INTRODUÇÃO À MATEMÁTICA DA MECÂNICA QUÂNTICA

ARTUR O. LOPES

Date: 13 de dezembro de 2019.

A Mecânica Quântica é a teoria que descreve as leis físicas que regem as partículas de massa muito pequena. O seu entendimento foi sem dúvida um dos grandes feitos científicos do século XX.

Meu objetivo ao escrever este texto foi permitir que os estudantes dos nossos cursos de Matemática possam entender e apreciar a beleza desta teoria. Foi planejado para ser uma primeira leitura sobre este tópico. O texto foi escrito por e para pessoas que são principiantes neste tópico. Tentei aqui apresentar as idéias fundamentais desta teoria partindo do princípio que o leitor é um estudante que raciocina de forma matematicamente rigorosa. A fundamentação matemática completa destas requer, no entanto, o estudo de tópicos mais avançados e que estão acima do escopo do presente texto.

Sobre os pré-requisitos para entender o livro posso afirmar que o primeiro capítulo exige apenas aquele conhecimento básico que constitui o material coberto nos primeiros três anos de um Bacharelado em Matemática. Aqui e ali mencionamos algum tópico mais avançado, mas, certamente, não é algo que o seu desconhecimento possa prejudicar o entendimento da seqüência lógica da narrativa. Destaco aqui o fato inequívoco que a Análise Funcional é uma das ferramentas fundamentais para o entendimento da Mecânica Quântica, mas de fato, nesta primeira parte não se usa realmente nenhum resultado sofisticado desta teoria. Um estudante que entendeu bem os tópicos usuais de Álgebra Linear em Espaços Vetoriais (dimensão finita) não vai ter dificuldade em extrapolar os resultados básicos já conhecidos para espaços de dimensão infinita.

Existem alguns livros excelentes que foram publicados recentemente sobre este assunto. Minha intenção foi produzir um texto em português que descreva a Mecânica Quântica de forma que seja matematicamente inteligível, e, ao mesmo tempo, que não se prenda a detalhes de formalização excessiva. Numa primeira leitura, este excesso a que me refiro, pode comprometer o entendimento das idéias fundamentais. Tentei manter a redação dentro de um equilíbrio entre estes dois extremos.

Os resultados considerados no texto, ou são rigorosamente demonstrados, ou, então são descritos através do apelo ao bom senso e a intuição matemática. No último caso sempre menciono referencias para consulta que permitirão ao leitor interessado aprofundar o material exibido. Exemplos são apresentados a cada momento em que introduzimos um novo conceito. Exemplo aqui significa exemplo matemático e não oriundo da Física.

A Mecânica Quântica é daquelas teorias em que se precisa compreender certa quantidade razoável de resultados para que o ”todo”faça sentido. Assim, minha sugestão é que o leitor tente entender a cada passo o que vai sendo exposto, mas sem se prender demais a aspectos que, eventualmente, não ficaram de todo claro. Muitas vezes, um pouco mais adiante no texto, aquilo que não foi de todo compreendido se esclarece quando olhado de um panorama mais amplo. Esta teoria é cheia de aspectos surpreendentes e que conflitam com a percepção do mundo sensível a nossa volta. Mas,

após certo tempo para amadurecimento dos conceitos em nossa mente, percebemos que a estrutura é bastante natural e simples. É claro, que existem aspectos técnicos da teoria que requerem a análise de questões matemáticas bastante complexas e sofisticadas. Mas, é possível obter um quadro razoavelmente consistente da teoria se nos permitirmos deixar "alguma sujeira matemática debaixo do tapete". Fiz isto no texto algumas poucas vezes, mas, asseguro, que de forma bem intencionada; foi em nome da didática do entendimento. Tentei dar no livro uma visão global (embora modesta dentro da amplidão do assunto) dos aspectos básicos da teoria.

Certa intuição do que acontece no fenômeno físico que a cada momento estamos matematicamente analisando é sem dúvida muito importante. Aqui este ponto é apresentado de forma breve e na maioria das vezes pictórica. A ênfase foi dada na apresentação de um formalismo matemático que descreva de forma compreensível a Física da Mecânica Quântica. Não é exigido nenhum pré-requisito de Física para entender o material que vamos cobrir. Apresentamos no texto alguns postulados cujo objetivo é apenas estabelecer o que o modelo matemático deveria incorporar para descrever a realidade observada nos fenômenos físicos. Servem basicamente de balizamento para a seqüência lógica dos resultados apresentados. Eles não são, necessariamente, um conjunto mínimo de postulados. Eventualmente, um deles pode aparecer mais tarde no texto como conseqüência de um teorema de caráter mais geral (que requer mais teoria).

Não irei discutir no texto os aspectos mais diretamente ligados a interpretação física dos fenômenos discutidos. Existem na teoria vários paradoxos e até mesmo conflitos de interpretação entre os eminentes físicos que trabalham nesta área. Por exemplo, a passagem gradual e continua da Mecânica Quântica (a Física das partículas com massa de dimensões atômicas) para as Leis da Mecânica Clássica (a Física das partículas com massa de dimensões macroscópicas) é um fenômeno que precisa ser melhor entendido.

Após um breve introdução de alguns pré-requisitos matemáticos apresentamos no texto dois grandes capítulos. O primeiro tem a intenção de dar ao leitor uma visão global do assunto. No segundo apresentamos vários tópicos que abordam questões um pouco mais específicas. É claro que apenas num livro não vamos poder abordar os incontáveis tópicos importantes nesta teoria. Varias seções da segunda parte podem ser lidas sem a leitura das outras. Eu entendo que o capítulo 2 pode ser dividido em varios blocos mais ou menos independentes

I. as seções 2.1 a 2.4 é um bloco,

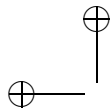
II. as seções 2.5 a 2.7 é outro,

III. as seções 2.9 a 2.15 mais um,

IV. as seções 2.16 e 2.17 mais outro.

As outras duas seções são totalmente independentes.

Na seção 0, onde apresentamos alguns pré-requisitos, tentamos explicar de forma breve e resumida o pouco que se vai precisar. Para o capítulo 2 as exigências de pré-requisitos são maiores. Estes vão depender da seção específica em consideração. Uma seção que tem importância fundamental (a 2.1) é a que trata do Teorema da decomposição espectral (o qual é enunciado sem demonstração). Este resultado é ilustrado com alguns exemplos. Mais uma vez, se bem compreendido o que afirma

este teorema, o leitor pode prosseguir e entender certos aspectos cruciais da teoria sem o conhecimento da prova do mencionado resultado.

Acredito que o entendimento dos princípios básicos da Mecânica Quântica por parte de um matemático genérico (que trabalha em qualquer área) vai enriquecer seu trabalho científico. Existem distintos aspectos da teoria que intersectam diversas áreas da Matemática: Análise Funcional, Equações Diferenciais Parciais, Geometria, Sistemas Dinâmicos, Processos Estocásticos, Teoria da Informação, Álgebra, etc... Problemas matemáticos nestas áreas de pesquisa podem ser algumas vezes considerados numa formulação mais ampla de tal forma que contemple os aspectos associados à quantização ou a não comutatividade.

Desejo agradecer a vários colegas com quem tive o prazer de discutir questões relativas ao presente texto: Ph. Thieullen, A. Baraviera, S. Prado, M. Terra Cunha, M. Disconzi, M. Sebastiani, C. F. Lardizabal, J. Mengue, J. Mohr, R. Souza, R. Bissacot, L. Ciolleti, R. Exel, Agradeço sobremaneira aos estudantes que assistiram a diversas edições do curso de Mecânica Quântica que ministrei no Inst. Mat. da UFRGS: Carlos Scarinci, Gilles Castro, Vilarbo Junior, Alvaro Kruger Ramos, Douglas dos Santos, Eduardo Fischer, Fagner Rodrigues, Mirian Telichevesky, Otavio Menezes, Patricia Klaser, Rangel Baldasso, Thomas Bartlett, Felipe Guarnieri, Jader Brasil, Josué Knorst, Luísa Borsato, Newton Loebens, Lucas Hataishi, Gustavo Pessil e William Braucks. Eles participaram da elaboração de diversas partes do presente texto. As eventuais incorreções, naturalmente, devem ser atribuídas ao autor. Os leitores que desejarem fazer comentários, apontar erros tipográficos, matemáticos, conceituais, ou, propor exercícios interessantes podem escrever para arturoscar.lopes@gmail.com Eles poderão ser de grande utilidade para alguma eventual nova edição do texto.

Alguns textos que fortemente recomendo e que, de alguma forma, influenciaram o presente livro são:

1. S. Gustafson and I. Sigal, Mathematical concepts of Quantum Mechanics, Springer Verlag
2. K. Hannabuss, An introduction to Quantum Theory, Oxford Press.
3. M. Schechter, Operator Methods in Quantum Mechanics, Dover.
4. L. Ballentine, Quantum Mechanics, World Scientific Press

O autor informa que o presente manuscrito ficará sempre disponível para acesso livre.

.

Conteúdo

0.1 Alguns pré-requisitos

Vamos inicialmente considerar algumas propriedades básicas dos espaços vetoriais de dimensão infinita (sobre o corpo dos números complexos) com produto interno. O caso em que o espaço vetorial tem dimensão finita é tratado com bastante detalhe na seção 21 de [222].

Referimos o leitor a [299] ou [266] para um aprofundamento dos diversos resultados e conceitos que vez por outra serão usados nesta seção.

Um elemento genérico em $\mathbb{C}$ é expresso como $z = a + b\,i$, onde, $i^{\,2} = -1$ e $a, b \in \mathbb{R}$.

Se $u = a + bi$ e $v = c + di$ então

$$u\,v = (a + b\,i)\,(c + d\,i) = a\,c + a\,di + bci + b\,d\,i^{\,2} = (ac - bd) + (ad + bc)\,i.$$

Todo número complexo $a + bi$ se escreve como

$$a\,+\,b\,i = \alpha\,e^{\beta\,i} = \alpha\,\,(\cos(\beta)\,+\,i\,\sin(\beta)),$$

onde $\alpha \geq 0$ e $0 \leq \beta < 2\,\pi$ são reais. Se chama $\alpha = |z|$ de norma (ou, amplitude) de $a + bi$ e β de fase de $a + bi$. Acima β= arc tang $\frac{b}{a}$ e $\alpha = \sqrt{a^2 + b^2}$.

Note que, dado $\beta \in [0, 2\pi)$, então $e^{\,\beta\,i} + e^{\,(\beta+\pi)\,i} = 0$.

$\overline{z} = (a\,-\,b\,i)$ denota o complexo conjugado de $z = a + b\,i$.

Note que se $\overline{z} = z$, então $a\,-\,b\,i = a\,+\,b\,i$, logo, $b = 0$. Assim, $z \in \mathbb{R}$.

Ainda, vale que $\overline{\overline{z}} = z$ e $z\,\overline{z} = a^2 + b^2 = |z|^2$.

Observe que $\overline{z_1\,+\,z_2} = \overline{z_1} + \overline{z_2}$ e $\overline{z_1\,z_2} = \overline{z_1}\,\overline{z_2}$.

Vamos considerar aqui prioritariamnte espaços vetoriais E sobre o corpo dos escalares complexos (ver seção 21 em [222] para definição exata). Assim, se $v_1, v_2 \in E$, e $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$, então está bem definido $\alpha_1\,v_1 + \alpha_2\,v_2 \in E$.

Se E é um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos $\mathbb{C}$, então um **produto interno** $< , >$ sobre E é uma função de $E \times E \to \mathbb{C}$, tal que, para qualquer $u, v, v' \in E$, e λ em $\mathbb{C}$, vale o seguinte:

1) $< u, v > = \overline{< v, u >}$; 2) $< u + u', v > = < u, v > \,+\, < u', v >$; 3) $< \lambda\,u, v > = \lambda\, < u, v >$; 4) $< u, u > > 0$, se $u \neq 0$.

Para mais detalhes recomendamos o leitor a seção 21 em [222] ou seção 60 em [159].

Fizemos a escolha $< \lambda\, u, v > = \lambda \ < u, v >$ e não $< u, \lambda\, v > = \lambda \ < u, v >$, o que seria tambem possivel assumir como definição.

Note que segue do que foi dito acima que $< u, \lambda\, v > = \overline{\lambda} \ < u, v >$. Ainda, $< u, v + v' > = < u, v > + < u, v' >$.

Ainda, para todo $v \in E$ vale que $< v, v >$ é real e não negativo. Além disso, $< v, v >= 0$, se e só se, $v = 0$.

Dado um produto interno $< \, , \, >$ sobre um espaço vetorial E podemos definir a norma associada através de

$$|v| = \sqrt{< v, v >}.$$

Uma norma $| \ |$ sobre E possui as propriedades: a) $|0| = 0$, b) $|v| \geq 0$, c) $|v| > 0$ se $v \neq 0$, d) $|u+v| \leq |u|+|v|$, para qualquer u, v, e finalmente, e) $|\lambda v| = |\lambda|\, |v|$, para qualquer escalar $\lambda \in \mathbb{C}$ e qualquer $v \in E$.

A propriedade $|u + v| \leq |u| + |v|$ é denominada de desigualdade triangular.

Assim, dado um espaço vetorial E com produto interno existe uma maneira natural de se obter uma norma em E.

Uma propriedade importante é a desigualdade de Cauchy-Schwarz (ver prova em [222] ou [223]) que diz que dados $v_1, v_2 \in E$, então

$$| < v_1, v_2 > | \leq |v_1|\, |v_2|,$$

Dada uma sequência de vetores $v_n \in \mathcal{H}$, diremos que a sequência v_n converge ao vetor $w \in \mathcal{H}$, se para qualquer $\epsilon > 0$, existe um $N > 0$, tal que para todo $n > N$, vale $|w - v_n| < \epsilon$. Este fato será denotado por

$$\lim_{n \to \infty} v_n = w.$$

A expressão v_n converge a w quando $n \to \infty$ também é bastante usada.

Dada uma sequência de vetores $v_n \in \mathcal{H}$, diremos que a sequência v_n é de Cauchy se para qualquer $\epsilon > 0$, existe um $N > 0$, tal que para todo $m, n > N$, vale $|v_m - v_n| < \epsilon$.

É fácil ver que toda sequência convergente é de Cauchy (isto segue da desigualdade triangular). Para espaços vetoriais de dimensão finita a

recíproca é verdadeira. Para espaços de dimensão infinita nem sempre vale a recíproca.

Um espaço normado é dito completo quando toda sequência de Cauchy converge.

Dizemos que a série $\sum_{n=0}^{\infty} x_n$, onde x_n está num espaço normado com norma $| \ |$, converge a x se $\lim_{k\to\infty} \sum_{n=0}^{k} x_n = x$. Denotamos $\sum_{n=0}^{\infty} x_n = x$. Se o espaço normado é completo vale a seguinte propriedade fundamental: se $\sum_{n=0}^{\infty} |x_n| < \infty$, então existe x tal que $\sum_{n=0}^{\infty} x_n = x$.

Definição 0.1. Um espaço vetorial $\mathcal{H}$ sobre o corpo dos complexos com produto interno $< \, , \, >$, e a correspondente norma

$$|v| = \sqrt{< v, v >},$$

para cada vetor em $\mathcal{H}$, será chamado de espaço de Hilbert se ele for completo para tal norma [198] [291] [76] [345].

O exemplo mais simples de espaço de Hilbert é o conjunto dos números complexos $\mathbb{C}$ com o produto interno $< u, v >= u\,\overline{v}$, onde $\overline{z}$ denota o complexo conjugado de z. Mais exatamente, se $u = a + bi$ e $v = c + di$, então, $u\,\overline{v} = (a + bi)\,(c - di)$. Neste caso, $|z| = \sqrt{x^2 + y^2}$, se $z = x + y\,i$.

$E = \mathbb{C}^n = \underbrace{\mathbb{C} \times \mathbb{C} \times ... \times \mathbb{C}}_{n \text{ vezes}}$ é um espaço vetorial sobre o corpo dos complexos $\mathbb{C}$.

Dados $u = (u_1, u_2, ..., u_n)$ e $z = (z_1, z_2, ..., z_n)$ em $\mathbb{C}^n$, o produto interno de u e z é, por definição,

$$< u, z > = \ u_1\,\overline{z_1} + u_2\,\overline{z_2} + ... + u_n\,\overline{z_n}.$$

Note que para $\lambda, u, v \in \mathbb{C}$, vale

$$< \ u, \lambda\, v > = \ \overline{\lambda} < u, v >$$

e

$$< \lambda\, u, \ v > = \ \lambda < u, v > .$$

O espaço vetorial complexo E acima é de Hilbert e tem dimensão finita. Os espaços vetoriais de Hilbert que vamos prioritariamente considerar no texto tem dimensão infinita.

Algumas vezes usamos também a notação $< x|y >$ em vez da expressão $< x, y >$.

Note que $< u, v > = < u|v > = \overline{< v|u >} = \overline{< v, u >}$.

As vezes se diz que $< u|v >$ é o "braket"do vetor u com o vetor v.

Definição 0.2. Dizemos que um conjunto ψ_n, $n \in \mathbb{N}$ é um conjunto enumerável ortonormal completo em $\mathcal{H}$ se,

1) $|\psi_n| = 1$, $\forall n \in \mathbb{N}$,

2) $< \psi_n, \psi_m > = 0$, $\forall m \neq n$,

3) para qualquer ψ existe uma escolha $\alpha_n \in \mathbb{C}$, $n \in \mathbb{N}$, tal que

$$\psi = \lim_{k \to \infty} \sum_{n=0}^{k} \alpha_n \, \psi_n.$$

Acima queremos dizer que se $v_k = \sum_{n=0}^{k} \alpha_n \, \psi_n \in \mathcal{H}$, então esta sequência v_k converge ao vetor ψ quando $k \to \infty$.

Alguns textos requerem que na Definição 0.1 se exija que o espaço de Hilbert possua um conjunto enumerável denso (chamado de espaço de Hilbert separável). Todos os espaços que vamos considerar aqui, entre eles o espaço das funções de quadrado integrável em $\mathbb{R}^n$, (ver definição a seguir) satisfazem tal propriedade.

O limite acima será descrito pela expressão formal

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \, \psi_n.$$

É fácil ver que neste caso vale $\psi = \sum_n < \psi_n|\psi > \psi_n$, ou seja, temos que $\alpha_n =< \psi_n|\psi >$. Além disto,

$$|\psi| = \sqrt{\sum_n |\alpha_n|^2} = \sqrt{\sum_n | < \psi_n|\psi > |^2}.$$

É importante não confundir o conceito de conjunto ortonormal completo com o conceito de base de um espaço vetorial (que considera apenas somas finita).

Os exemplos de espaços de Hilbert que consideraremos usualmente são

1) $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)(dx)$ é o conjunto dos $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$ tais que,

$$\int \int ... \int |\phi|^2(x)dx = \int |\phi(x_1, x_2, .., x_n)|^2 \, dx_1 \, dx_2 \, ... \, dx_n < \infty,$$

onde $dx = dx_1 \, dx_2 \, ... \, dx_n$ é a medida de Lebesgue usual. Uma função ϕ do tipo acima é chamada de função de quadrado integrável.

Para $\phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$, e $\psi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$, tais que, $\int |\phi|^2(x)dx < \infty$, $\int |\psi|^2(x)dx < \infty$, definimos o produto interno $< \phi, \psi >= \int \phi(x) \, \overline{\psi(x)} \, dx$. Neste caso, $|\phi| = \sqrt{\int |\phi(x)|^2 \, dx} = \sqrt{< \phi, \phi >}$ define uma norma que o torna um espaço de Hilbert. Note que uma função ψ neste espaço esta definida a menos de um conjunto de medida de Lebesgue zero [122]. Dizer que duas funções ϕ, ψ estão ϵ próximas significa que

$$\sqrt{\int |\phi(x) - \psi(x)|^2 \, dx} < \epsilon.$$

Referimos o leitor a [27] para maiores detalhes sobre o assunto. Observamos que não necessitaremos no texto de um entendimento maior sobre a medida de Lebesgue em $\mathbb{R}^n$; apenas saber que a classe das funções integráveis à Lebesgue é maior do que aquelas integráveis no sentido usual de Riemann e ainda que a norma $|\phi| = \sqrt{< \phi, \phi >}$ torna as funções de quadrado integrável (considerando a integral de Lebesgue) um espaço normado completo.

Este espaço vetorial tem dimensão infinita. Para maiores detalhes sobre o espaço $\mathcal{L}^2$ referimos o leitor a [27].

2) Seja A um retângulo finito em $\mathbb{R}^n$, ou seja,

$$A = [c_1, d_1] \times [c_2, d_2] \times ... \times [c_n, d_n].$$

Então consideraremos o espaço vetorial complexo $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(A)(dx)$, onde dx é a medida de Lebesgue em A, e para $\phi : A \to \mathbb{C}$, e $\psi : A \to \mathbb{C}$, tais que, $\int_A |\phi|^2(x)dx < \infty$, $\int_A |\psi|^2(x)dx < \infty$, nós definimos $< \phi, \psi >= \int_A \phi(x) \, \overline{\psi(x)} \, dx$. Neste caso $|\phi| = \sqrt{\int_A |\phi(x)|^2 \, dx}$.

Este espaço também é de Hilbert e tem dimensão infinita.

3) Seja M uma variedade diferenciável de dimensão n e uma forma volume dx (ver [225] ou [213] para definição e propriedades). Denote

também por dx sua extensão a uma medida de Lebesgue em M. Então consideraremos $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(M)(dx)$. Para $\phi : M \to \mathbb{C}$, e $\psi : M \to \mathbb{C}$, tais que, $\int_M |\phi|^2(x)dx < \infty$, $\int_M |\psi|^2(x)dx < \infty$, nós definimos $< \phi, \psi >= \int_M \phi(x)\,\overline{\psi(x)}\,dx$.

Neste caso $|\phi| = \sqrt{\int_M |\phi(x)|^2\,dx}$.

Um caso particularmente interessante é o toro de dimensão n que pode ser descrito por $[0, 2\,\pi)^n \subset \mathbb{R}^n$ onde os pontos da fronteira são identificados da forma usual. Neste caso, se toma dx como a medida usual de Lebesgue em $[0, 2\,\pi)^n \subset \mathbb{R}^n$ (algumas vezes dividida por $(2\pi)^n$ para ser normalizada). Por exemplo, o círculo S^1 será identificado com $[0, 2\,\pi)$.

Note que para $\lambda \in \mathbb{C}$, and, $\phi, \psi \in \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)(dx)$, vale

$$< \lambda\,\phi, \psi > = \ \lambda < \phi, \psi >$$

e

$$< \phi, \lambda\,\psi > = \ \overline{\lambda} < \phi, \psi > .$$

Observação: Se para v_1, v_2 fixos, vale que para todo v

$$< v_1, v > \ = \ < v_2, v >,$$

ou, de forma equivalente se vale que

$$< v_1 - v_2, v > \ = \ 0,$$

então $v_1 = v_2$.

De fato, tome $v = v_1 - v_2$, e então, se $v_1 - v_2 \neq 0$, temos contradição (porque $< v, v >= 0$, se e só se, $v = 0$).

Uma função $L : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ é linear se para qualquer $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$ e $v_1, v_2 \in \mathcal{H}_1$, vale

$$L(\alpha_1\,v_1 + \alpha_2\,v_2) = \alpha_1\,L(v_1) + \alpha_2 L(v_2).$$

Dados dois espaços de Hilbert complexos $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$, uma função linear $L : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$, é denominado de Operador Linear.

Dados dois operadores lineares $L_1 : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$, e $L_2 : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_3$, fica bem definida a composta $L = L_2 \circ L_1$, onde $L : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_3$. Note que L também é linear. As vezes se escreve $L_2\,L_1$ para representar $L_2 \circ L_1$.

Note que nem sempre $L_2 \circ L_1 = L_1 \circ L_2$, mesmo quando $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_2 = \mathcal{H}_3$.

O operador indentidade $I : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é aquele que para cada $x \in \mathcal{H}$ temos que $I(x) = x$.

Note que para qualquer operador linear $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ vale que $A\,I = A = I A$.

Dado $L : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, e $n > 0$, temos que $L^n : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ denota a composição de L consigo mesmo n vezes. Note que $L^n \circ L^m = L^{n+m}$. De forma consistente com esta propriedade denotamos $L^0 = I$.

Dado o operador linear $L : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$, dizemos que o operador linear $G : \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1$, é o inverso de L se $G \circ L = I = L \circ G$. De forma um pouco mais precisa: $G \circ L = I_1$ onde I_1 é o operador identidade em $\mathcal{H}_1$, e $L \circ G = I_2$ onde I_2 é o operador identidade em $\mathcal{H}_2$.

O operador inverso de L é denotado por L^{-1}. Se L tem inverso dizemos que ele é inversível. A composta de operadores inversíveis é inversível. Mais exatamente, neste caso $(A\,B)^{-1} = B^{-1}\,A^{-1}$.

Dado o operador linear $L : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ o núcleo de L é o conjunto dos $v \in \mathcal{H}_1$ tais que $L(v) = 0$. O operador L é injetivo se e só se o núcleo de L é só o vetor 0.

A imagem de $L : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ é o conjunto dos vetores da forma $L(v) \in \mathcal{H}_2$ quando v varia em todo domínio $\mathcal{H}_1$. Dizemos que L é sobrejetivo se a imagem de L é todo $\mathcal{H}_2$.

L tem inversa se e só se L é injetivo e sobrejetivo.

Vamos considerar abaixo dois espaços de Hilbert $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$, com os respectivos produtos internos $<,>_1$ e $<,>_2$, e as respectivas normas $|\ |_1$ e $|\ |_2$.

Note que segue da última observação acima que se dois operadores lineares $L_1 : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$, e $L_2 : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$, forem tais que, para todo $v_1 \in \mathcal{H}_1, v_2 \in \mathcal{H}_2$ vale

$$< L_1(v_1), v_2 > \;=\; < L_2(v_1), v_2 >,$$

então $L_1 = L_2$.

De fato, para cada v_1 fixo, aplique o resultado acima para todos os v_2 possíveis. Segue que $L_1(v_1) = L_2(v_1)$.

Definição 0.3. O operador linear $L : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$ é dito limitado (ou, continuo) se

$$\sup_{v \neq 0} \frac{|L(v)|_2}{|v|_1} < \infty.$$

Denominamos de $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ o espaço vetorial dos Operadores Lineares limitados de $\mathcal{H}_1$ em $\mathcal{H}_2$. Ainda, $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ denota os Operadores Lineares limitados de $\mathcal{H}$ em $\mathcal{H}$.

Denotamos por $\mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ o espaço vetorial complexo de todos os operadores lineares de $\mathcal{H}_1$ para $\mathcal{H}_2$.

Em dimensão infinita, nem sempre um operador linear é uma função continua (usando as normas correspondentes).

Definição 0.4. Seja $L : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$. O valor $\sup_{v\neq 0} \frac{|L(v)|_2}{|v|_1}$ é denotado por $|L|$ e é chamado de norma do operador L em $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$.

Um fato importante é que $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ munido desta norma de operadores é um espaço completo [296]. Assim, dada uma sequência de operadores $L_n \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ tal que $\sum_{n=0}^{\infty} |L_n| < \infty$, então o somatório $\sum_{n=0}^{\infty} L_n = L$ para um único $L \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$.

Note que para todo $L \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ vale que $|L^n| \leq |L|^n$.

Segue disto que todo operador limitado é contínuo, isto é, se $x_n \to x$ quando $n \to \infty$, então, $L(x_n) \to L(x)$ quando $n \to \infty$.

A composta de operadores limitados é um operador limitado.

No espaço vetorial $\mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ o sentido de convergencia de elementos $A_n \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2) \to A \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ pode ter varios sentidos.

a) Dizemos que $\lim_{n\to\infty} A_n = A$ no sentido da convergencia na norma se $\lim_{n\to\infty} |A_n - A| = 0$.

b) Dizemos que $\lim_{n\to\infty} A_n = A$ no sentido forte se para qualquer $x \in \mathcal{H}_1$, temos que $\lim_{n\to\infty} |(A_n - A)(x)| = 0$.

c) Dizemos que $\lim_{n\to\infty} A_n = A$ no sentido fraco se para qualquer $x \in \mathcal{H}_1$, temos que $\lim_{n\to\infty} | < x , (A_n - A)(x) > | = 0$.

Finalmente, $\mathcal{H}^*$ denota o conjunto dos operadores lineares limitados $L : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$. Para cada $L \in \mathcal{H}^*$ existe um único $u \in \mathcal{H}$, tal que para todo $v \in \mathcal{H}$, vale $L(v) =< v, u >$ (ver Theorem 4.12 in [300] ou [305]).

Definição 0.5. Dado $L \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ existe um único operador $L^* \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_2, \mathcal{H}_1)$ tal que para qualquer $u \in \mathcal{H}_2$, $v \in \mathcal{H}_1$ vale

$$< L(v), u >_2 \; = \; < v, L^*(u) >_1 .$$

O operador L^* existe pelo parágrafo anterior e é denominado de adjunto de L.

Segue da definição que se $A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$, então $(A+B)^* = A^* + B^*$.

Note ainda que se $A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_1)$, então $(AB)^* = B^* A^*$.

Seja $(a+bi)$ matriz um por um, que age em $\mathbb{C}$. Então, $(a+bi)^* = (a-bi)$.

Ainda, $(\,(a+b\,i)A\,)^* = (a-b\,i)\,A^*$.

Pode-se mostrar que a igualdade $|L| = |L^*|$ vale para operadores limitados (ver seção 2.6). Portanto, a função $L \to L^*$ é uma isometria.

Além disso vale, $|L_1^* - L_2^*| = |L_1 - L_2|$. Portanto a função $L \to L^*$ é contínua quando restrita ao operadores limitados (e usando a norma de operadores).

Pode-se mostrar que $|LL^*| = |L|^2$ (ver seção 2.6).

Dado um subespaço linear fechado M de $\mathcal{H}$ denominamos de $M^\perp$, o conjunto dos vetores v de $\mathcal{H}$, tal que, para todo u em M vale que $< u, v >= 0$.

Todo $v \in \mathcal{H}$ pode ser escrito de maneira única como $v = u_1 + u_2$, onde $u_1 \in M$ e $u_2 \in M^\perp$. Podemos definir $P_M(v) = u_1$. Isto define um operador limitado com norma 1 que é denominado a projeção ortogonal de v sobre M. Note que $P_M^2 = P_M \circ P_M = P_M$. Ainda, vale que $P_M^* = P_M$.

Um operador P que satisfaz $P^2 = P$ é chamado de operador projeção.

Definição 0.6. Um operador P em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ que satisfaz $P^2 = P \circ P = P^*$ e $P = P^*$ é denominado genericamente de operador de projeção ortogonal.

Pode se mostrar que dado tal P existe M subespaço linear fechado tal que $P = P_M$.

Exemplo 0.1. Dado $\lambda \in \mathbb{R}$, considere o operador $P_\lambda : \mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx) \to \mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx)$, tal que para $\psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx)$, temos que $P_\lambda(\psi) = I_{(-\infty,\lambda)}\ \varphi$, onde, $I_{(-\infty,\lambda)}$ é o indicador do intervalo $(-\infty, \lambda)$.

É fácil ver que P_λ é um operador de projeção ortogonal.

Definição 0.7. Um operador L em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ é dito autoadjunto se $L = L^*$.

Também é usual a nomenclatura operador Hermitiano (estamos considerando no texto espaços vetoriais sobre o corpo dos complexos)

A soma de operadores autoadjuntos é autoadjunto. **A composição de operadores autoadjuntos nao é autoadjunto.** Isto é valido somente se os operadores comutam. Se L é autoadjunto e β é real, então, $\beta\,L$ é autoadjunto.

Definição 0.8. Um operador U em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ é dito unitário se ele satisfaz $U^* \circ U = I = U \circ U^*$.

Sendo assim U é inversível e $U^{-1} = U^*$. Note que se U é unitário, então, para todo $v \in \mathcal{H}$, vale que $|v| = |U(v)|$.

De fato,

$$|v|^2 \;=< v, v > \,=\, < I(v), v > \,=$$
$$< (U^* \circ U)\,(v), v > \,=\, < U(v), U(v) > \,=\; |U(v)|^2.$$

A composição de operadores unitários é unitário. Se U é unitário e $\beta \in \mathbb{C}$ tem norma 1, então, $\beta\, U$ é unitário.

Definição 0.9. Dado um operador $L : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, dizemos que $\lambda \in \mathbb{C}$ é autovalor se existe $v \neq 0$, $v \in \mathcal{H}$, tal que, $L(v) = \lambda\, v$. Neste caso dizemos que v é autovetor associada ao autovalor λ.

A multiplicidade de um autovalor é a dimensão do espaço vetorial dos autovetores associados a este autovalor.

Exemplo 0.2. Suponha que $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$.

A matriz
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & 1 \end{pmatrix}$$
é unitaria.

Seus autovalores e autovetores são

$$\frac{\sqrt{2}}{2}(1-i), \text{ com autovetor } (-1,1)$$

$$\frac{\sqrt{2}}{2}(1+i), \text{ com autovetor } (1,1)$$

Num certo sentido, como veremos mais tarde, os operadores lineares auto-adjuntos correspondem aos números reais e os unitários aos números complexos de norma 1.

Um operador autoadjunto limitado $L : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ num espaço de Hilbert de dimensão infinita pode não possuir autovalores.

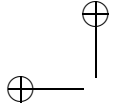
Definição 0.10. Chamamos de espectro de $L : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, o conjunto

$$\sigma(L) = \{\lambda \in \mathbb{C} \text{ tais que } (L - \lambda\, I) \text{ não tem inversa em } \; \mathcal{B}(\mathcal{H})\}.$$

Um autovalor λ está sempre no espectro (o núcleo de $(L - \lambda I)$ não é so o vetor 0).

Algumas vezes λ está no espectro porque $(L - \lambda I)$ não tem inversa; algumas vezes λ está no espectro porque $(L - \lambda I)$ tem inversa mas $(L - \lambda I)^{-1}$ não é um operador limitado.

Dizemos que o autovalor é isolado se existe um intervalo aberto que o contem que não possui outros elementos do espectro. Se $\mathcal{H}$ tem dimensão finita o espectro são apenas os autovalores e todos são isolados (um autovalor pode não ter multiplicidade um é claro).

Definição 0.11. O conjunto dos autovalores de L que são isolados do espectro e de multiplicidade finita é denominado de espectro pontual de L e denotado por $\sigma_p(L)$.

No caso em que $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)(dx)$ o autovetor é chamado de autofunção.

Seja o espaço de Hilbert complexo $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}([0, 2\pi])(dx)$ e L o operador tal que para uma $\psi : [0, 2\pi] \to \mathbb{C}$ temos $L(\psi) = \phi$, onde $\phi(x) = \frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}$. Mais precisamente, se $\psi(x) = a(x) + i\,b(x)$, temos que $L(\psi)(x) = \frac{d^2\,a(x)}{dx^2} + i\,\frac{d^2\,b(x)}{dx^2}$. Este operador L não está definido para todo ψ em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}([0, 2\pi])(dx)$, mas apenas para as funções ψ que são duas vezes diferenciáveis (e a segunda derivada está em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}([0, 2\pi])(dx)$). O conjunto de tais funções define um conjunto denso em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}([0, 2\pi])(dx)$. É usual na teoria, como veremos, que os operadores mais importantes estão definidos num domínio denso no espaço de Hilbert.

Para um $n \in \mathbb{Z}$ fixo tome $\psi_n(x) = e^{i\,n\,x} = \cos(n\,x) + i \sin(n\,x)$. É fácil ver que $L(\psi_n) = -\,n^2\,\psi_n$. Assim, cada ψ_n é uma autofunção para L. Observe que os ψ_n, $n \in \mathbb{Z}$, definem os elementos em que se expressa a Série de Fourier na sua forma complexa (ver [53] ou [327]).

O autovalor $-\,n^2$ tem multiplicidade (complexa) igual a 2.

Outro exemplo: seja o espaço de Hilbert real $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2_{\mathbb{R}}([0, 2\pi])(dx)$ e L o operador tal que para uma $\psi : [0, 2\pi] \to \mathbb{R}$ temos $L(\psi) = \phi$, onde $\phi(x) = -\frac{d^2\,\psi(x)}{dx^2}$. Observe que para cada $n \in \mathbb{N}$ fixo temos que $L(\cos(n\,x)) = n^2 \cos(n\,x)$. Ainda, $L(\sin(n\,x)) = n^2 \sin(n\,x)$. Note, neste caso, que uma função qualquer ϕ em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{R}}([0, 2\pi])(dx)$ pode ser expressa em Série de Fourier na sua forma real (em função de seno e coseno) conforme [53] ou [327].

O autovalor n^2, $n \geq 1$, tem multiplicidade (real) igual a 2.

Se pode escrever qualquer $\phi : [0, 2\pi) \to \mathbb{C}$ que esteja no espaço L^2 na forma

$$\phi = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \alpha_n e^{i\,n\,x} = \lim_{N \to \infty} \sum_{n=-N}^{n=N} \alpha_n e^{i\,n\,x}.$$

onde $\alpha_n \in \mathbb{C}$.

É claro que $\sigma_p(L) \subset \sigma(L)$ pois, se $\lambda \in \sigma_p(L)$, então $(L - \lambda\, I)$ não tem inversa.

Definição 0.12. Os elementos do espectro que não fazem parte do espectro pontual constituem o que se denomina espectro contínuo.

Definição 0.13. O complemento do espectro é chamado de resolvente e denotado por $\rho(L)$.

Para todo λ no resolvente temos que $(L - \lambda\, I)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$.

Referimos o leitor a seção 4 em [20] ou cap. 2 em [76] para mais detalhes sobre os tópicos acima. Estes conceitos serão considerados mais tarde para operadores L não limitados.

Se L é autoadjunto então os autovalores λ de L são reais. De fato, note que se $L(v) = \lambda v$, deduzimos que

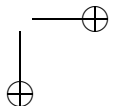
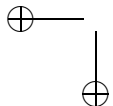
$$< L(v), v > \; = \; < \lambda\, v, v > \; = \; \lambda\, |v|^2,$$

e

$$< L(v), v > \; = \; < L^*(v), (v) > \; = \; < v, L(v) > \; = \; < v, \lambda\, v > \; = \; \overline{\lambda}\, |v|^2.$$

O Teorema Espectral no caso de dimensão finita (ver [222]) afirma o seguinte: se $L : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$ é autoadjunto, então existem n vetores $v_1, v_2, ..., v_n \in \mathbb{C}^n$, e valores reais $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$, tais que $L(v_j) = \lambda_j\, v_j$, $j = 1, 2, ..., n$.

Ainda, $v_1, v_2, ..., v_n$ geram $\mathbb{C}^n$. Além disso, $< v_j, v_k > = 0$, para $j \neq k$.

Existem versões deste teorema para operadores autoadjuntos em espaços de Hilbert de dimensão infinita (ver [296]). Na seção 2.1 este resultado desempenha um papel fundamental.

Se U é unitário então os autovalores λ de U são números complexos de norma igual a 1. De fato, note que se $U(v) = \lambda v$, para $v \neq 0$, então

$$|v|^2 \; = < v, v > = < U^* \circ U(v), v > = < U(v), U(v) > =$$

$$< \lambda\, v, \lambda v > = \; \lambda \; \overline{\lambda} |v|^2 \; = \; |\lambda|^2 \, |v|^2.$$

Uma versão do Teorema Espectral é válido para operadores unitários (ver [222] para o caso de dimensão finita).

Note que para um operador auto-adjunto os autovetores associados a autovalores distintos são ortogonais. De fato, suponha que $L(v_1) = \lambda_1 v_1$ e $L(v_2) = \lambda_2 v_2$, então como os autovalores são reais

$$(\lambda_1 - \lambda_2) \; < v_1, v_2 > \; = \; < \lambda_1 \, v_1, v_2 > \; - \; < v_1, \lambda_2 \, v_2 > \; =$$

$$< L(v_1), v_2 > \; - \; < v_1, L(v_2) > = < L(v_1), v_2 > \; - \; < L(v_1), v_2 > = 0.$$

Assim, se $\lambda_1 \neq \lambda_2$, então, $< v_1, v_2 > \; = \; 0$. Os operadores unitários e auto-adjuntos desempenham um papel importantíssimo na Mecânica Quântica. Vamos precisar em breve de um conceito um pouco mais geral do que o de auto-adjunto.

Definição 0.14. Dizemos que um operador A em $\mathcal{L}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$ é compacto se ele leva conjuntos limitados contidos em $\mathcal{H}_1$ em conjuntos cujo fecho é compacto em $\mathcal{H}_2$. O conjunto dos operadores compactos é denotado por $\mathcal{C}(\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2)$.

Este conceito não deve ser confundido com o conceito de base de um espaço vetorial (que é sempre relativo a somas finitas).

O teorema fundamental para os operadores autoadjuntos compactos, ou seja, $L \in \mathcal{C}(\mathcal{H})$ (ver [176] cap III.3 ou Theorem 4.22 in [83]) ou [266] [267] [198], [345] [76] [296] afirma que existe um conjunto enumerável de autovetores ψ_n, $n \in \mathbb{N}$, associadas a autovalores $\lambda_n \in \mathbb{R}$, dois a dois ortogonais, tais que para qualquer ψ em $\mathcal{H}$ existem $\alpha_n \in \mathbb{C}$, $n \in \mathbb{N}$, tais que

$$\psi = \lim_{n \to \infty} \sum_{j=0}^{n} \alpha_j \, \psi_j.$$

O complemento do Kernel do operador compacto $L \in \mathcal{C}(\mathcal{H})$ é constituido por um número finito de autofunções ortogonais ψ_j, ou então o conjunto dos infinitos autovalores λ_j, $j \in \mathbb{N}$, se acumula em 0.

Acima utilizamos no limite, é claro, a convergência na norma do espaço de Hilbert.

Pode se assumir que $< \psi_n, \psi_n > = 1$ para todo n. Neste caso, dizemos que os ψ_n, $n \in \mathbb{N}$, formam um **conjunto ortonormal enumerável completo de autovetores** de L. No caso em que $\mathcal{H}$ é o espaço vetorial complexo $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)(dx)$ diremos que os ψ_n, $n \in \mathbb{N}$ formam um **conjunto ortonormal enumerável completo de autofunções (ou autovetores) de** L.

Os operadores autoadjuntos e unitarios agindo em $\mathbb{C}^d$ possuem ambos um conjunto ortonormal (finito) completo de autovetores (Teorema da decomposição espectral conforme [222])

Infelizmente, os operadores naturais na Mecânica Quântica são diferenciáveis (ver a próxima seção 1.1) e não são compactos. Mas em muitos casos o inverso G (a direita) deste operador é compacto (ver [176]). Assim, se pode obter para cada autovalor $\beta_n \neq 0$ do operador compacto G obtido acima que seu inverso $\beta_n^{-1} = \lambda_n$, $n \in \mathbb{N}$, é autovalor do operador diferenciável em análise. A autofunção ψ_n, $n \in \mathbb{N}$, (associada a β_n) do operador compacto será também autofunção (associada a $\lambda_n = \beta_n^{-1}$) do operador diferenciável. Referimos o leitor ao cap IV de [176] ou [333] ou [83] para maiores detalhes sobre estas considerações.

Observação: Nem sempre os operadores autoadjuntos que iremos considerar possuem um conjunto orthonormal completo enumerável. O espectro, em geral, não precisa ser constituído só de autovalores e pode ser um conjunto não enumerável. Em alguns casos o operador pode até não possuir autovalor algum. Um resultado importante que iremos utilizar mais tarde se chama o Teorema Espectral para operadores autoadjuntos não-limitados.

Voltando ao caso que mencionávamos antes, em que existe um conjunto ortonormal enumerável completo de autovetores de L, podemos considerar também a expressão

$$\psi = \lim_{n \to \infty} \sum_{j=0}^{n} < \psi, \psi_j > \psi_j.$$

Disto vai seguir que (se L é uma função contínua)

$$L(\psi) = L(\lim_{n \to \infty} \sum_{j=0}^{n} \alpha_j \, \psi_j) = \lim_{n \to \infty} L(\sum_{j=0}^{n} \alpha_j \, \psi_j)$$

$$\lim_{n\to\infty} \sum_{j=0}^{n} \alpha_j \, \lambda_j \, \psi_j, \quad \text{onde } \alpha_j \; = \; < \psi, \psi_j >$$

Desta forma a ação de L num vetor qualquer tem uma forma muito simples de ser calculada.

Usaremos, para simplificar a notação, expressões do tipo

$$L(\sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \, \psi_j) = \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \, \lambda_j \, \psi_j,$$

para descrever a passagem dos limites acima.

Note o seguinte fato extremamente importante: dado ψ , ele pode ser escrito como $\sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \, \psi_j$, onde $\alpha_j \in \mathbb{C}$. Os ψ_j, $j \in \mathbb{N}$, associados aos λ_j são dois a dois ortogonais, assim, se pode mostrar que

$$< L(\psi), \psi > = < L(\sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \, \psi_j), \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \, \psi_j > =$$

$$< \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \, \lambda_n \, \psi_j, \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j \, \psi_j > = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_j \alpha_j \, \overline{\alpha_j} = \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_j |\alpha_j|^2 \in \mathbb{R}.$$

Ou seja, **se L é autoadjunto, então $< L(\psi), \psi > \in \mathbb{R}$ para qualquer** ψ.

Podemos mostrar isto de outra forma: se L é autoadjunto

$$\overline{< L(\psi), \psi >} = < \psi, L(\psi) > = < L(\psi), \psi > .$$

Note que no exemplo mencionado antes em que $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2([0, 2\pi])(dx)$ e L o operador tal que $L(\psi)(x) = \frac{d^2 \, \psi(x)}{dx^2}$, as autofunções ψ_n, $n \in \mathbb{Z}$, associadas ao autovalores n^2, são tais que qualquer $\phi \in \mathcal{L}^2([0, 2\pi])(dx)$ pode ser expressa em Série de Fourier

$$\phi = \sum_{n \in \mathbb{Z}} a_n \frac{\psi_n}{|\psi_n|} \; = \; \lim_{N\to\infty} \sum_{n=-N}^{N} a_n \, \frac{\psi_n}{|\psi_n|},$$

$a_n \in \mathbb{C}$ (ver [53]). Note que $< \psi_n, \psi_m > = 0$ para $n \neq m$. Este exemplo ilustra o caso em que existe um conjunto ortonormal completo para um certo operador L.

Lembre que fixado um subespaço fechado F do Espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, **a projeção ortogonal** P_F **de** $\mathcal{H}$ **sobre** F foi definida da seguinte forma: seja o subespaço vetorial $F^\perp = \{v \in \mathcal{H}$ tais que $< v, f >= 0$, para todo $f \in F\}$. Então, $\mathcal{H}$ é soma direta de F e $F^\perp$. Assim todo vetor $u \in \mathcal{H}$ pode ser escrito de maneira única como $u = v + f$, onde, $v \in F^\perp$ e $f \in F$. Por definição, $P_F(u) = f \in F$.

Note também que $|P_F(u)| = |f| \leq |u|$. Assim, se $F \neq 0$, então P_F é sempre limitado e tem norma igual a 1.

Note que $P_F^2 = P_F$.

Os operadores projeção ortogonal desempenham um papel muito importante na teoria.

Seja $u_1 = v_1 + f_1$ e $u_2 = v_2 + f_2$, $v_i \in F^\perp$ e $f_i \in F$, $i = 1, 2$, como acima. Ora, $< P_F(u_1), u_2 > = < f_1, v_2 + f_2 > = < f_1, f_2 > = < v_1 + f_1, f_2 > = < u_1, P_F(u_2) >$, sendo assim concluímos que P_F é autoadjunto.

Fixado um elemento ψ de norma 1 no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, então P_ψ **denota a projeção no espaço vetorial unidimensional** $\mathcal{Y}$ **gerado por** ψ**.**

Fizemos a escolha $< \lambda u, v > = \lambda < u, v >$ **e não** $< u, \lambda v > = \lambda < u, v >$**, e assim** $P_\psi(\phi) =< \phi|\psi > \psi = \psi < \phi|\psi >$**.**

De fato na decomposição de $\phi = u + v$, onde $v \in \mathcal{Y}^\perp$ (o subespaço ortogonal ao gerado por ψ) tome $u =< \phi|\psi > \psi$ e assim vai decorrer que $v \in \mathcal{Y}^\perp$. De fato, $v = \phi - < \phi|\psi > \psi$ e desta forma

$$< v\,,\,\psi\,,>=< \phi - < \phi|\psi > \psi\,,\psi >=< \phi\,,\psi > - << \phi|\psi > \psi\,,\psi >=$$

$$< \phi, \psi > - < \phi|\psi >< \psi, \psi >=< \phi, \psi > - < \phi|\psi >= 0$$

Uma notação muito útil é a seguinte: denotamos vetores v no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ por $< v|$. Assim, segundo esta convenção, um operador linear A aplicado a $< v|$ resultará (agindo a esquerda) no novo vetor $< A(v)| =< v|\,A$.

A projeção P_ψ, sobre o vetor ψ pode ser expressa na notação de Dirac como

$$P_\psi = |\psi >< \psi|$$

agindo em vetores $< \phi|$ a esquerda

De fato,

$$< \phi|\ P_\psi\ = < \phi|\psi >\ < \psi|\ =< \phi|\,|\psi > < \psi| =< \phi|\,(\,|\psi > < \psi|\,).$$

Por exemplo, neste formalismo se pode escrever de maneira natural

$$< P_\psi(\phi)\, ,\, \theta > \,=\, << \phi|\psi > \ \psi, \theta > =$$

$$=< \phi, \psi >< \psi|\theta > \,=\, < \phi| \ \ |\psi >< \psi| \ \ |\theta >=< \psi|\theta >< \phi, \psi > .$$

Se denomina $< \psi|$ de ”bra”e $|\psi >$ de ”ket”. Note que o ”bra-ket”$< \psi|\psi >$ é um escalar em $\mathbb{C}$ e o ”ket-bra”$|\psi >< \psi|$ é um operador.

Esta notação, conhecida como de Dirac, é muito apropriada nos cálculos envolvendo operadores e vetores.

Suponhamos que o operador autoadjunto A é tal que existem ψ_n, $n \in \mathbb{N}$, que formam um conjunto ortonormal completo enumerável. Denote por λ_n os autovalores associados. Então, se pode escrever de maneira sintética

$$A = \sum_n \lambda_n \, P_{\psi_n} = \sum_n \lambda_n |\psi_n >< \psi_n|.$$

Neste formalismo obtemos

$$< A(\,\phi\,)\,| \,=\, < \phi\,|\,A = \sum_n \lambda_n \ < \phi|\,P_{\psi_n} =$$

$$\sum_n \lambda_n < \phi|\,|\psi_n >< \psi_n| \,=\, \sum_n \lambda_n < \phi\,|\,\psi_n >< \psi_n|.$$

Ainda,

$$v = \sum_n < v\,|\,\psi_n >< \psi_n|.$$

Desta forma temos uma maneira alternativa de descrever a ação o operador identidade agindo (a esquerda) no vetor $v =< v|$ através da expresão

$$\sum_n |\psi_n >< \psi_n| = I.$$

Destacamos aqui o fato acima ocorre **quando existe** um conjunto ortonormal enumerável completo de autofunções de L

Definição 0.15. Dado um operador linear A em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, onde $\mathcal{H}$ é um espaço de Hilbert (sobre os complexos como sempre), então está bem definido

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\, A^n.$$

Chama-se e^A de exponencial do operador A.

Isto segue do fato que $|A^n| \leq |A|^n$, para todo n, que $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ é completo e, ainda que, toda série absolutamente convergente em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ é convergente.

Note que

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\,|A^n| \leq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\,|A|^n = e^{|A|}.$$

Observe que $e^0 = I$ (o operador identidade).

Se $AB = BA$, então $e^{A+B} = e^A\, e^B$ (ver [76],[97]). Se $AB \neq BA$, pode acontecer que não seja verdadeira a relação $e^{A+B} = e^A\, e^B$.

Note que $A\,(-A) = (-A)\,A$, e assim

$$e^A\, e^{-A} = e^{A-A} = e^0 = I = e^{-A}\, e^A,$$

e portanto para qualquer A temos que e^A é inversível e $(e^A)^{-1} = e^{-A}$.

Seja A em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$. Sabe-se [296] [76] que se considerarmos a norma de operadores para considerar o limite na definição de derivada, então

$$\frac{d\, e^{t\,A}}{dt} = A\, e^{t\,A} = e^{t\,A}\, A,\, \forall t \in \mathbb{R}.$$

Assim, para v fixo em $\mathcal{H}$ temos que

$$\frac{d\, e^{t\,A}(v)}{dt} = A\;\, e^{t\,A}(v)\, \forall t \in \mathbb{R}.$$

Sendo assim, em dimensão finita, isto é quando o operador linear A é descrito pela ação de uma matriz, a solução da equação diferencial linear

$$x'(t) \;= A\, x(t),\;\; \text{com a condição inicial} \;\;\; x(0) = v,$$

é $x(t) = e^{t\,A}(v)$.

Outro fato relevante na teoria é que se L é autoadjunto, e, se estiver bem definido $e^{i\,L} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\,(i\,L)^n$, teremos que este último operador é unitário. De fato note que $(iL)^* = -i\,L^*$, e assim,

$$(e^{i\,L})^* = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\,(-\,i\,L^*)^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}(-\,i\,L)^n = e^{-iL}.$$

Como $i\,L$ comuta com $-i\,L$, temos que [97]

$$(e^{i\,L})^*\, e^{i\,L} = (e^{-i\,L})\, e^{i\,L} = e^{-i\,L+i\,L} = e^0 = I = e^{i\,L}\,(e^{i\,L})^*.$$

Logo, e^{iL} é unitário se L é autoadjunto. Da mesma forma, dado t real temos que e^{tiL} é unitário se L é autoadjunto. Desta forma para qualquer vetor w temos que $|\, e^{tiL}(w)\,| = |w|$ para qualquer ≥ 0.

Observe que em dimensão finita, isto é quando o operador linear L é descrito pela ação de uma matriz, a solução da equação diferencial linear

$$x' = i\,L\,x, \text{ com a condição inicial } \; x(0) = v,$$

é $x(t) = e^{tiA}(v)$.

Assim, se a condição inicial v satisfaz $|v| = 1$, temos que para todo $t \geq 0$ vale $|\, e^{tiA}(v)\,| = 1$. Este fato descreve em termos simplificados a ideia básica por trás da equação de Schrodinger que apresentaremos em breve.

Observe que usamos na demonstração acima o fato que a função $A \to A^*$ é contínua.

Uma espécie de recíproca do resultado acima e que relaciona operadores autoadjuntos e unitários é o Teorema de Stone que pode ser encontrado em [43].

Observação 1. Para A autoadjunto não limitado podemos definir o seguinte operador limitado:

$$A_\lambda = \frac{1}{2}\lambda^2[(A + i\lambda I)^{-1} + (A - i\lambda I)^{-1}], \qquad \lambda > 0.$$

Então, tomando $A_\lambda \to A$, quando $\lambda \to \infty$, e usando o fato que A_λ é limitado, podemos definir $e^{A_\lambda} \to e^A$ via limite (para maiores detalhes ver seção 2.20 proposição 2.52).

A solução de $x' = A(x)$, quando A não é limitado, também pode ser obtida via a expressão $x(t) = e^{tA}(x_0)$, onde o exponencial foi definido (via limite em λ) da forma acima.

Se A é da forma $A = \sum_n \lambda_n\, P_{\psi_n}$, onde $\psi_n, n \in \mathbb{N}$, define um conjunto ortonormal completo, então é fácil ver que $A^2 = \sum_n \lambda_n^2\, P_{\psi_n}$. Mais geralmente, $A^k = \sum_n \lambda_n^k\, P_{\psi_n}$. Dada um função f em série de potencias $f(z) = \sum_k a_k\, z^k$, com raio de convergência R, se o operador A é limitado e tem norma menor que R, então está bem definido $f(A) = \sum_k a_k A^k$. Isto segue da propriedade $|A^k| \leq |A|^k$, para todo k, e do fato que num

espaço normado completo, no caso $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, toda série absolutamente convergente é convergente [182] [97].

Segue também que $f(A) = \sum_n f(\lambda_n)\, P_{\psi_n}$, contanto que todos $|\lambda_n| < R$.

Assim, o cálculo da exponencial de uma matriz fica mais fácil:

$$e^{i\,A} = \sum_n e^{i\,\lambda_n}\, P_{\psi_n}.$$

Será necessário considerar em breve operadores lineares $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ definidos num subespaço denso do espaço de Hilbert $\mathcal{H}$. Denotaremos por $D(A) \subset \mathcal{H}$ o correspondente domínio de definição. Se nada for dito ao contrário $D(A) = \{v \text{ tais que } A(v) \in \mathcal{H}\}$. Neste caso, usaremos indistintamente a notação $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, ou, $A : D(A) \to \mathcal{H}$.

Definição 0.16. $A : D(A) \to \mathcal{H}$ operador no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ é limitado se existe $C > 0$ tal que $A(v) < C|v|, \forall v \in D(A)$, onde $D(A)$ é um domínio denso em $\mathcal{H}$.

O seguinte resultado será de grande utilidade (demonstração na proposição 2.50 seção 2.20).

Lema 0.1. *: Seja $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, operador linear no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ definido em $D(A)$. Se existe $C > 0$ tal que para qualquer ϕ em $D(A)$ (denso em $\mathcal{H}$) vale $|A(\phi)| \leq C\,|\phi|$, então, a ação de A pode ser extendida a $\mathcal{H}$, também denotada por A, que torna $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um operador limitado definido em todo $\mathcal{H}$ com norma menor ou igual a C.*

Este lema segue do fato que dados espaços métricos completos M, N, se $S \subset M$ é denso em M, e $f : S \to N$ é uniformemente contínua, então f se estende a uma função contínua em M (ver [223] para mais detalhes).

Apresentamos uma prova de tal resultado na última seção do livro.

Definição 0.17. Seja $A : D(A) \subset \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, operador linear no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ definido em $D(A)$, o adjunto de A é o operador A^* tal que $\langle A^*\psi, \phi\rangle = \langle \psi, A\phi\rangle$, para toda $\phi \in D(A)$, e, para toda $\psi \in D(A^*) = \{\psi \in \mathcal{H} |\, \langle \psi, A\phi\rangle \leq c_\psi \|\phi\|, \text{ para toda } \phi \in D(A)\}$. Assumimos que $D(A^*)$ é denso em $\mathcal{H}$.

Dado A o operador A^* definido em $D(A^*)$ fica definido de maneira única.

Definição 0.18. Seja $A : D(A) \to \mathcal{H}$ e $D(A) = D(A^*)$. A é autoadjunto se $A = A^*$ em $D(A)$.

Definição 0.19. A é simétrico, se $\langle A\psi, \phi\rangle = \langle \psi, A\phi\rangle, \forall \psi, \phi \in D(A)$.

Note que A autoadjunto $\Rightarrow$ A simétrico, e, A autoadjunto $\Leftrightarrow$ A simétrico e $D(A) = D(A^*)$

Vamos apresentar a seguir alguns exemplos de operadores que serão considerados nas próximas seções.

1) A identidade: $I : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, isto é $I(\psi) = \psi$, para todo ψ. Neste caso, o domínio $D(I) = \mathcal{H}$, e I é autoadjunto e limitado.

2) Multiplicação por coordenada:

$$\psi \to x_j\psi(x) = x_j\psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n),$$

$j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$, onde $A : D(A) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \to \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Usaremos a notação $\mathcal{X}_j : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \to \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$, $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$.

De outra forma: fixado j, dado ψ, se dizemos que $\mathcal{X}_j(\psi) = \varphi$, então é porque para todo $x = (x_1, x_2, ..., x_n)$ vale que

$$\varphi(x_1, x_2, ..., x_n) = x_j\,\psi(x_1, x_2, .., x_n).$$

Neste caso, $D(\mathcal{X}_j) = \{\psi \mid$ tais que $x_j\,\psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)$ seja uma função em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)\}$.

Por exemplo, para $n = 3$, temos que dado ψ, tal que,

$$(x_1, x_2, x_3) \to \psi(x_1, x_2, x_3) = \sin(x_1 + x_2 + x_3)\, e^{-4\,(x_1^2+x_2^2+x_3^2)^6},$$

então, $\mathcal{X}_2(\psi) = \phi$, onde

$$\phi(x_1, x_2, x_3) = x_2\, \sin(x_1 + x_2 + x_3)\, e^{-4\,(x_1^2+x_2^2+x_3^2)^6}.$$

Note que como x_j é sempre um número real, para qualquer $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$

$$< \mathcal{X}_j\psi, \phi >= \int x_j\psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)\,\overline{\phi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)}\,dx =< \psi, \mathcal{X}_j\phi > .$$

Logo $\mathcal{X}_j$ é autoadjunto. Claramente $\mathcal{X}_j$ não é limitado. O espectro de $\mathcal{X}_j$ não é enumerável. De fato, todo valor real λ está no espectro, pois,

dado ϕ, a função $(\mathcal{X}_j - \lambda\, I)(\phi)$, necessariamente se anula em $x_j = \lambda$. Assim, $(\mathcal{X}_j - \lambda\, I)$ não pode ser sobrejetiva.

3) Multiplicação por coordenada: $\psi \to x_j\psi(x) = x_j\psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n), j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$, onde $A : \mathcal{L}^2([0, 2\pi)^n)(dx) \to \mathcal{L}^2([0, 2\pi)^n)(dx)$. Usaremos também a notação $\mathcal{X}_j : \mathcal{L}^2([0, 2\pi)^n)(dx) \to \mathcal{L}^2([0, 2\pi)^n)(dx)$, $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$. Neste caso, é usual considerar

$$D(A) = \{\psi \in \mathcal{L}^2([0, 2\pi)^n)(dx)$$

tais que ψ tem uma extensão contínua a $[0, 2\pi]^n\}$.

O espaço $(0, 2\pi)^n$ quando se identificam de forma periódica os pontos da fronteira é chamado de toro de dimensão n e denotado por $\mathbb{T}^n$.

Como x_j é sempre um número real, para qualquer $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$

$$< \mathcal{X}_j\psi, \phi >= \int_{[0,2\pi)^n} x_j\psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)\, \overline{\phi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)}\, dx =< \psi, \mathcal{X}_j\phi > .$$

Logo $\mathcal{X}_j$ é autoadjunto. Claramente $\mathcal{X}_j$ neste caso é limitado.

4) Multiplicação por uma função $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ contínua, ou seja, $\psi \to V\,\psi$.

O operador será denotado por $\mathcal{V}$, onde $\mathcal{V} : D(\mathcal{V}) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \to \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$.

De outra forma: dado ψ, se dizemos que $\mathcal{V}(\psi) = \varphi$, então é porque para todo $x = (x_1, x_2, ..., x_n)$ vale que

$$\varphi(x_1, x_2, ..., x_n) = V\,(x_1, x_2, ..., x_n)\,\psi(x_1, x_2, ..., x_n).$$

Neste caso, $D(\mathcal{V}) = \{\psi \mid$ tais que

$$V(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)\ \psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)$$

seja uma função em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)\}$.

Por exemplo, para $n = 3$, se $V(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_2^4$, então

$$\mathcal{V}(\,\sin(x_1 + x_2 + x_3)\,e^{-4\,(x_1^2+x_2^2+x_3^2)^6}\,) =$$

$$(x_1^2 + x_2^4)\,\sin(x_1 + x_2 + x_3)\,e^{-4\,(x_1^2+x_2^2+x_3^2)^6}\,.$$

Note que serão necessárias várias restrições a V para que $D(\mathcal{V})$ seja denso. Vamos sempre assumir implicitamente que isto ocorre.

Note que como $V(x)$ é sempre um número real

$$< \mathcal{V}\psi, \phi >= \int V(x_1, ..., x_n)\, \psi(x_1, ..., x_n)\, \overline{\phi(x_1, ..., x_n)}\, dx =< \psi, \mathcal{V}\phi > .$$

Logo, $\mathcal{V}$ é autoadjunto. Claramente $\mathcal{V}$ é limitado se V é limitada. Se V não é constante, então o espectro de $\mathcal{V}$ não é enumerável. De fato, todo valor real λ na imagem de V está no espectro, pois, dado ϕ, a função $\psi = (\mathcal{V} - \lambda\, I)(\phi)$, necessariamente se anula em x tal que $V(x) = \lambda$. Isto, é $\psi(x) = 0$ se $V(x) = \lambda$. Assim, $(\mathcal{V} - \lambda\, I)$ não pode ser sobrejetiva para tal λ.

É fácil ver que se λ é um número real que está a um distância positiva da imagem de V, então $(\mathcal{V} - \lambda\, I)(\phi)$ é injetivo e sobrejetivo.

Suponha que $\mathcal{V}_1$ denote o operador multiplicação pela função V_1 e $\mathcal{V}_2$ denote o operador multiplicação pela função V_2. A composta $\mathcal{V}_2\, \mathcal{V}_1$ é dada pela multiplicação pela funçao $V_2\, V_1$. Assim, $\mathcal{X}_1\, \mathcal{X}_2$ denota a mutiplicação por $x_1\, x_2$. O operador multiplicação por $x_1\, x_3 + x_2^2$ pode ser descrito pelo operador $\mathcal{X}_1\, \mathcal{X}_3 + \mathcal{X}_2^2$.

No mundo clássico os observáveis são descritos por funções $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ e os valores que podem ser observados estão na imagem de V. No mundo quantico os observáveis são descritos por operadores autoadjuntos e os valores observados são os elementos do espectro (ver seções 1.1 e 2.2). O exemplo particular acima (onde consideramos o operador $\mathcal{V}$ associado a V) mostra que neste caso esta analogia se encaixa perfeitamente.

5) Multiplicação por $V : [0, 2\pi]^n \to \mathbb{R}$ contínua e periódica em $[0, 2\pi]^n$, ou seja, $\psi \to V\, \psi$. O operador será denotado por $\mathcal{V}$, onde

$$\mathcal{V} : \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx) \to \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx).$$

Neste caso, $D(\mathcal{V}) = \mathcal{L}^2([0, 2\pi]^n)(dx)$.

Claramente $\mathcal{V}$ é limitado e autoadjunto.

Note que para todo $\psi \neq 0$ vale

$$\frac{|\mathcal{V}\psi|}{|\psi|} = \sqrt{\frac{< \mathcal{V}\psi, \mathcal{V}\psi >}{< \psi, \psi >}} =$$

$$\sqrt{\frac{\int_{[0,2\pi]^n} |V(x_1,...,x_n)|^2 \, |\psi(x_1,...,x_n)|^2 \, dx}{\int_{[0,2\pi]^n} \, |\psi(x_1,...,x_n)|^2 \, dx}} \leq \sup_{x\in[0,2\pi]^n} \{|V(x)|\}.$$

Vai haver uma dramática diferença entre a análise dos autovalores dos operadores autoadjuntos agindo em $\mathcal{L}^2([0,2\pi)^n)(dx)$ e agindo em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ (ver [296])

O valor real $\hbar \sim 6.626069...10^{-34}$ é denominado de constante de Planck e desempenha um fundamental na teoria.

5) o operador momento: fixado $j \in \{1,2,3,...,n\}$, considere $\psi \to -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j}$. Note que $\psi(x) = a(x) + i\, b(x)$ toma valores em $\mathbb{C}$, e, assim, $\frac{\partial \psi}{\partial x_j} = \frac{\partial a}{\partial x_j} + i\, \frac{\partial b}{\partial x_j}$ também.

Neste caso, como veremos, o espectro é não enumerável.

Definição 0.20. O j-ésimo operador momento será denotado por $\mathcal{P}_j$, $j \in \{1,2,3,...,n\}$, onde $\mathcal{P}_j : D(\mathcal{P}_j) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \to \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$,

$$\mathcal{P}_j(\psi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} (\psi).$$

De outra forma: fixado j, dado ψ, se dizemos que $\mathcal{P}_j(\psi) = \varphi$, então é porque para todo $x = (x_1, x_2, ..., x_n)$ vale que

$$\varphi(x_1, x_2, ..., x_n) \, = \, -\, i\, \hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \, \psi(x_1, x_2, .., x_n).$$

Por exemplo, para $n = 3$ temos que

$$\mathcal{P}_2(x_2^2 \, e^{-(x_1^2+x_2^2+x_3^2)}\,) = -i\hbar \, \frac{\partial}{\partial x_2} (x_2^2 \, e^{-(x_1^2+x_2^2+x_3^2)}\,) =$$

$$-i\hbar \, [2\, x_2 \, e^{-(x_1^2+x_2^2+x_3^2)} - 2\, x_2^3 \; e^{-(x_1^2+x_2^2+x_3^2)}].$$

Dizemos que ψ é diferenciável com suporte compacto se é diferenciável de classe C^1, e, ainda quando existe uma bola compacta $\overline{B(R)}$ de raio R tal que ψ seja nula fora desta bola.

Neste caso, $D(\mathcal{P}_j) = \{\psi \,|$ tais que ψ é de classe C^1 com suporte compacto (assim, $-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j}$ é uma função em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ $)\}$. Pode se mostrar que $D(\mathcal{P}_j)$ é denso em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$.

Note que esta não é a única escolha de domínio que se vai fixar. Cada escolha de possível domínio vai definir um operador $\mathcal{P}_j$ agindo no espaço de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$.

Vamos mostrar que $\mathcal{P}_j$ é simétrico no caso $n = 1$. Assim, $j = 1$. Como ψ tem suporte compacto, existe R tal que, $\psi(x) = 0$, se $|x| > R$.

Resulta da integração em $[-R, R]$ e de

$$\frac{\partial[\psi(x_1)\overline{\phi(x_1)}]}{\partial x_1} = \frac{\partial \psi(x_1)}{\partial x_1}\ \overline{\phi(x_1)} + \psi(x_1)\,\frac{\partial \overline{\phi(x_1)}}{\partial x_1},$$

que, para todo $\phi, \psi \in D(\mathcal{P}_1)$ vale

$$< \mathcal{P}_1 \psi, \phi >= \int_{-R}^{R} - i\hbar \frac{\partial \psi(x_1)}{\partial x_1}\ \overline{\phi(x_1)}\, dx =$$

$$= \int_{-R}^{R} \psi(x_1) \overline{- i\hbar \frac{\partial \phi(x_1)}{\partial x_1}}\ \ dx =< \psi, \mathcal{P}_1 \phi > .$$

Logo, $\mathcal{P}_1$ é simétrico. Da mesma forma se mostra que $\mathcal{P}_j$ é autoadjunto (não vamos entrar aqui em questões técnicas, mas é preciso escolher o domínio denso de forma apropriada). O operador $\mathcal{P}_j$ não é limitado. O espectro de $\mathcal{P}_j$, como veremos, não é enumerável.

Definição 0.21. O operador

$$\mathcal{P} = \sum_{j=1}^{n} \mathcal{P}_j$$

é chamado de operador momento. Neste caso, $D(\mathcal{P}) = \cap_{j=1}^{n} D(\mathcal{P}_j)$.

6) O operador j-momento ao quadrado: fixado $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$, considere $\mathcal{P}_j \circ \mathcal{P}_j = \mathcal{P}_j^2$. Neste caso, $\psi \to -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial^2 x_j} = \mathcal{P}_j^2 \psi$.

Definição 0.22. O j-ésimo operador momento ao quadrado será denotado por $\mathcal{P}_j^2$, $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$, onde $\mathcal{P}_j^2 : D(\mathcal{P}_j^2) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \to \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$,

$$\mathcal{P}_j^2 \psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial^2 x_j}(\psi).$$

$D(\mathcal{P}_j^2) = \{\psi$ é de classe C^2 e existe uma bola compacta $\overline{B(R)}$ de raio R tal que ψ é nula fora desta bola$\}$.

De outra forma: fixado j, dado ψ, se dizemos que $\mathcal{P}_j^2(\psi) = \varphi$, então é porque para todo $x = (x_1, x_2, ..., x_n)$ vale que

$$\varphi(x_1, x_2, ..., x_n) = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial^2 x_j} \psi(x_1, x_2, .., x_n).$$

$\mathcal{P}_j^2$, $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$, é autoadjunto pois é a composta de operadores autoadjuntos que comutam. O operador $\mathcal{P}_j^2$, $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$, não é limitado.

7)

O operador $\triangle$ tal que $f \to \triangle(f) = \frac{\partial^2}{\partial^2 x_1} f + .. + \frac{\partial^2}{\partial^2 x_n} f$, quando $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ é duas vezes diferenciável é denominado de Laplaciano.

Definição 0.23. O operador momento ao quadrado em $\mathbb{R}^n$: denote $\mathcal{P}^2$ o operador

$$\mathcal{P}^2 = \sum_{j \in \{1,2,3,...,n\}} \mathcal{P}_j^2,$$

$\mathcal{P}^2 : \cap_j D(\mathcal{P}_j^2) \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \to \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Este operador é autoadjunto por ser a soma de operadores autoadjuntos. Note que

$$\mathcal{P}^2 \psi = -\hbar^2 \triangle \psi,$$

onde $\triangle$ é o operador Laplaciano.

O espectro de $\mathcal{P}^2$ não é enumerável. Uma questão de notação: observe que $\mathcal{P}^2$ não é $\mathcal{P} \circ \mathcal{P}$. O domínio do operador Laplaciano agindo no espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ é o conjunto das funções que possuem a segunda derivada em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$.

8) O operador momento ao quadrado em $[0, 2\pi)^n = \mathbb{T}^n$: denote $\mathcal{P}^2$ o operador $\sum_{j \in \{1,2,3,...,n\}} \mathcal{P}_j^2$, assim $\mathcal{P}^2 : \cap_j D(\mathcal{P}_j^2) \subset \mathcal{L}^2([0, 2\pi)^n)(dx) \to \mathcal{L}^2([0, 2\pi)^n)(dx)$, onde,

$D(\mathcal{P}_j^2) = \{\psi$ tem derivada parcial de ordem dois em relação a j e é contínua em $(0, 2\pi)^n$, e, ainda, ψ tem uma extensão duas vezes diferenciável a $[0, 2\pi]^n\}$.

Este operador é autoadjunto por ser a soma de operadores autoadjuntos. O espectro de $\mathcal{P}^2$ é enumerável.

No caso $n = 1$ as funções do tipo $\phi_n(x) = e^{n\,i\,x}, n \in \mathbb{Z}$, são tais que $\mathcal{P}^2 \phi_n = \hbar^2\, n^2 \phi_n$. Os $\phi_n(x) = e^{n\,i\,x}, n \in \mathbb{Z}$, (os elementos da Série de

Fourier) formam um conjunto ortonormal completo de autofunções de $\mathcal{P}^2$.

9) O operador momento ao quadrado em uma variedade diferenciável Riemanniana compacta M: denote $\mathcal{P}^2$ o operador $-\hbar^2 \triangle$, onde o Laplaciano é derivado a partir da estrutura Riemanniana (see [145]).

$$\sum_{j\in\{1,2,3,\ldots,n\}} \mathcal{P}_j^2 = \mathcal{P}^2 : D(\mathcal{P}^2) \subset \mathcal{L}^2(M)(dx) \to \mathcal{L}^2(M)(dx),$$

onde, dx é a extensão a medida de Lebesgue de alguma foma volume em M, e, $D(\mathcal{P}^2) = \{\psi$ é de classe C^2 em M, $\psi : M \to \mathbb{C}$ $\}$.

O caso anterior é um caso particular deste.

O espectro de $\mathcal{P}^2$ é enumerável. No caso de superfícies compactas de curvatura negativa existem questões interessantes que relacionam os autovalores de $-\hbar^2 \triangle$ com o espectro de comprimentos das geodésicas periódicas via funções Zeta. A análise do limite semiclássico é um tópico muito estudado neste caso (ver [45] [164]).

O fluxo geodésico descreve o sistema clássico associado (ver [228]).

10)

Definição 0.24. Um operador integral $\mathcal{K} : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx) \to \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dy)$ é aquele que pode se expresso por

$$\mathcal{K} : \psi \to \int K(x,\cdot)\psi(x)dx,$$

onde $K(x,y)$ é uma função contínua.

Mais precisamente, dizemos que $\mathcal{K}(\psi) = \phi$, quando $\phi(y) = \mathcal{K}(\psi)(y) = \int K(x,y)\psi(x)dx$.

Observe que tal $\mathcal{K}$ descreve uma transformação linear.

Se K for uma função limitada então $\mathcal{K}$ é operador limitado. Neste caso, $D(\mathcal{K}) = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Referimos o leitor a [20] para resultados gerais sobre operadores integrais.

$K(x,y)$ é chamado de núcleo (ou, kernel) integral do operador $\mathcal{K}$.

Se K é tal que $K(x,y) = K(y,x)$, e toma valores reais, então, $\mathcal{K}$ é autoadjunto.

De fato, isto segue de

$$< \mathcal{K}\psi, \phi >= \int \int K(x,y)\psi(x)\,\overline{\phi(y)} dx\, dy =$$

$$\int \int \psi(x)\,\overline{K(y,x)\phi(y)} dx\, dy =< \psi, \mathcal{K}\phi > .$$

Da expressão acima segue que bastaria a igualdade $K(x,y) = \overline{K(y,x)}$ para $\mathcal{K}$ ser autoadjunto.

Finalmente:

Teorema 0.2. *Supondo K limitada, se $\int \int |K(x,y)|^2 dx\, dy < \infty$, então o operador $\mathcal{K}$ é compacto.*

Assim, pelo Teorema da decomposição espectral vai possuir um conjunto ortonormal completo enumerável de autovetores (seção X.2 [345]).

Proposição 0.3. *Se $\mathcal{K}_1$ e $\mathcal{K}_2$ são operadores integrais (com núcleos K_1 e K_2 respectivamente), então o núcleo integral de $\mathcal{K} = \mathcal{K}_1\mathcal{K}_2$ é*

$$K(x,y) = \int_{\mathbb{R}^n} K_1(x,z) K_2(z,y) dz. \tag{0.1}$$

De fato, dado ψ note que

$$\mathcal{K}_1\mathcal{K}_2(\psi)(x) = \int K_1(x,z)\,[\mathcal{K}_2(\psi)(z)]\, dz =$$

$$\int K_1(x,z)\,[\int K_2(z,y)\psi(y)\, dy]\, dz = \int [\int K_1(x,z)\, K_2(z,y)\, dz]\, \psi(y)\, dy.$$

Observe que a ação de um operador integral é uma extensão natural da idéia de descrever uma transformação linear pela ação de uma matriz. De fato, se em vez de $x, y \in \mathbb{R}$ considerassemos $i, j \in \{1, 2, .., d\}$, então $K(x,y)$ corresponde a matriz $A_{i,j}$, $i, j \in \{1, 2, .., d\}$. A matriz A agindo num vetor $(v_1, v_2, .., v_d)$ resulta num vetor $(u_1, u_2, .., u_d)$.

Assim $\phi(y) = \mathcal{K}(\psi)(y) = \int K(x,y)\psi(x)dx$, corresponde a $u_j = \sum_{i=1}^d A_{i,j} v_i$.

Nesta associação seria natural pensar que o traço da matriz A, ou seja, $\sum_{i=1}^d A_{i,i}$ corresponde a $\int K(x,x)dx$. O traço do operador $\mathcal{K}$ resulta num conceito extremamente importante na teoria como veremos. Como veremos na seção 1.9 esta analogia de fato não é apenas uma mera formalidade para certas classes de operadores integrais (ver [20]).

Definição 0.25. Um operador autoadjunto A é positivo (denotamos tal fato por $A \geq 0$), se $\langle \psi, A\psi \rangle \geq 0, \quad \forall \psi \in D(A)$. Um operador autoadjunto A é estritamente positivo se $\langle \psi, A\psi \rangle > 0, \quad \forall \psi \in D(A), \psi \neq 0$.

Um operador autoadjunto positivo tem apenas autovalores não-negativos. De fato, $0 \, \leq \, < \psi, A(\psi) > = < \psi, \lambda \, \psi > = \lambda < \psi, \psi >$.

Exemplo 0.3. Suponha que $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$.

A matriz

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} i \\ \frac{1}{\sqrt{2}} i & 1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

é autoadjunta é positiva. Seus autovalores são positivos e somam 1.

Vamos mostrar que, por exemplo, $\mathcal{P}_j^2$, $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$, é positivo. A prova sera feita para o caso $n = 1$. Assim abaixo $x_1 = x$.

Note que por integração por partes (para $\frac{\partial}{\partial x_1} [\frac{\partial \psi(x_1)}{\partial x_1} \; \overline{\psi(x_1)}]$)

$$< \mathcal{P}_1^2 \psi, \psi > = \int_{-R}^{R} - \hbar^2 \frac{\partial^2 \psi(x_1)}{\partial^2 x_1} \; \overline{\psi(x_1)} \, dx = \int_{-R}^{R} \hbar^2 \frac{\partial \psi(x_1)}{\partial x_1} \overline{\frac{\partial \psi(x_1)}{\partial x_1}} \, dx > 0.$$

Note que como ψ tem suporte compacto, se $\frac{\partial \psi}{\partial x_1} = 0$, para todo x_1, então, $\psi = 0$.

Segue do demonstrado acima que $\mathcal{P}^2$ é também estritamente positivo.

De maneira mais geral, se A é autoadjunto, então A^2 é sempre positivo. De fato

$$< A^2(\psi) \, \psi > = < A(\psi), A^*(\psi) \; > = < A(\psi), A(\psi) \; > \geq \; 0.$$

Assim, o resultado mencionado anteriormente segue de tomar $A = \mathcal{P}_j$ e usar o raciocínio acima.

Segue da mesma forma que todo operador projeção P_F é positivo porque $P_F = P_F^2$.

Note que a composta de operadores positivos pode não ser positivo.

Na álgebra dos operadores $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, os operadores autoadjuntos desempenham o papel dos números reais (dentro da algebra dos complexos $\mathbb{C}$). Os da forma A^2 desempenham o papel dos números reais não negativos. Os unitários desempenham o papel dos números complexos de norma 1. Se A é autoadjunto e positivo, existe B tal que $B^2 = A$ [300] [345]. Ou seja, que A possui "raiz quadrada". É fácil deduzir este fato se A é da forma $A = \sum_n \lambda_n \, P_{\psi_n}$. Basta tomar $B = \sum_n \sqrt{\lambda_n} \, P_{\psi_n}$.

Denotamos por $\nabla\psi = \nabla_x\psi$, a expressão

$$\nabla\psi(x) = (\frac{\partial\psi(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial\psi(x)}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial\psi(x)}{\partial x_n}).$$

Dependendo do contexto algumas vezes iremos denotar

$$\nabla\psi(x) = (\frac{\partial\psi(x)}{\partial x_1} + \frac{\partial\psi(x)}{\partial x_2} + ... + \frac{\partial\psi(x)}{\partial x_n})$$

Uma notação melhor para a última expressão acima, e que é utilizada em alguns textos, é $\nabla \cdot \psi$

Capítulo 1

Uma Visão Panorâmica da Mecânica Quântica

1.1 Estados e a equação de Schrodinger

Para o leitor apreciar a diferença do setting Clássico e Quântico saiba que:

1) M = massa do Sol = $1,99\,10^{30}Kg$ e D= distancia Terra-Sol: 149.597.891 km

Razão $M/D = 10^{22}g/m$.

2) m = massa do núcleo do Hidrogênio = $1,67\,10^{-27}Kg$ e d =raio da primeira órbita do elétron = $0,53\,10^{-10}m$

Razão $m/d = 10^{-14}g/m$.

É este quociente de escalas de unidade de medida que vai determinar a natureza do problema. No segundo caso não teremos mais uma descrição determinística mas sim estatística. As "forças"(o que existe na verdade seria "em termos"menos o gradiente do potencial) que agem ao nível quântico são de intensidade bem distinta das que agem ao nivel clássica (interação gravitacional do Sistema Terra-Lua, por exemplo).

Se o sistema físico a ser analisado for governado pelo Hamiltoniano,

$$H(x,p) = \frac{|p|^2}{2m} + V(x) = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} + V(x),$$

$x, p \in \mathbb{R}^3$, mas para uma massa m muito pequena, então não valem mais as leis da Mecânica Clássica, e sim as leis da Mecânica Quântica. Vamos elaborar um pouco sobre esta afirmação.

No setting clássico $\frac{p_1^2+p_2^2+p_3^2}{2m}$ é o termo de energia cinética e $V(x)$ o termo de energia potencial. Assim o Hamiltoniano $H(x,p)$ é a soma destas duas energias. Desta forma H descreve a energia total.

A particula é descrita na Mecânica Clássica de forma deterministica pela trajetória $(x(t),p(t))$ que satisfaz **a equação de Hamilton**

$$x_j'(t) = \frac{\partial H(x,p)}{\partial p_j},\ p_j'(t) = -\frac{\partial H(x,p)}{\partial x_j},\ \ j \in \{1,2,3\},$$

com condição inicial $(x(t_0),p(t_0)) = (x_0,p_0)$ (ver [9], [228], [357] ou [2]).

Suponha que a força $F(x)$ satisfaça a equação $-\frac{\partial V(x)}{\partial x} = F(x)$ para todo x. Neste caso dizemos que a força deriva do potencial V.

Note que a expressão da equação diferencial acima apenas afirma que $p(t) = mx'(t)$ e que $p'(t) = F(x(t))$. Ou seja, afirma que $mx''(t) = F(x(t))$, expressão esta que descreve a conhecida Lei de Newton.

Dizemos que x descreve a posição da partícula e que p descreve o momento da partícula. Note que o momento, neste caso, é a massa vezes a velocidade da partícula.

Em resumo, na Mecânica Clássica se a partícula no tempo t_0 esta em $(x_0,p_0) \in \mathbb{R}^6$, ela então estará, de forma determinística, no tempo t em $(x(t),p(t)) \in \mathbb{R}^6$, seguindo o caminho $(x(t),p(t))$ que satisfaz a equação de Hamilton (uma equação diferencial ordinária de primeira ordem em $\mathbb{R}^6$)

$$x'_j(t) = p_j(t) \quad \text{e} \quad {p_j}'(t) = -\frac{\partial V(x)}{\partial x_j},\ \ j \in \{1,2,3\}.$$

No caso em que $H(x,p) : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ e $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, onde $V : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, então a equação de Hamilton é

$$x'(t) = p(t) \quad \text{e} \quad p'(t) = -\frac{d\,V(x)}{d\,x}.$$

Por exemplo, no caso unidimensional quando $H(x,p) = \frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2}$ temos que $(x(t),p(t)) = R\,(\cos t, -\sin t)$, $R > 0$, descreve distintas soluções da equação de Hamilton.

Na Mecânica Clássica os valores da energia varrem um contínuo de possibilidades, ou seja, os valores de $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$. Uma propriedade importante é a conservação de energia total: se $(x(t),p(t))$ satisfaz a equação de Hamilton para um dado Hamiltoniano H, então, $H(x(t),p(t))$ é constante (isto é, não depende de t).

Na Mecânica Hamiltoniana as variáveis x e p estão em igualdade de condições (coisa que não acontece com x e $v = x'$ na Mecânica Lagrangiana). Esta desvinculação de x e p está, de certa forma, dentro do espírito dos fundamentos da Mecânica Quântica.

Na Mecânica Quântica só vamos considerar, inicialmente, a posição x da partícula. Esta vai ser descrita via a probabilidade de encontrá-la numa certa região do espaço num **certo determinado tempo**.

A descrição no sentido quântico de uma densidade associada ao momento p será analisada mais tarde.

Considere $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$ (onde dx é a integração usual em $\mathbb{R}^3$) que é o conjunto das funções $\psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$, tais que $\int |\psi(x)|^2\, dx = \int |\psi(x_1, x_2, x_3)|^2\, dx_1\, dx_2\, dx_3 < \infty$. Neste espaço consideramos o produto interno definido por $\langle \phi, \psi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(x)\bar{\psi}(x)dx$ [76] [300] [291].

Uma função $\psi : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$ em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$ tal que $|\psi| = 1$ será chamado de **estado** (ou, função de onda). Ele é uma entidade matemática que vai descrever a aleatoriedade de uma entidade física que é a partícula quântica. A distribuição da posição espacial $x = (x_1, x_2, x_3)$ da partícula quântica vai ser descrita pela densidade $|\psi(x_1, x_2, x_3)|^2$.

Considere uma familia $\psi_t : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$, indexada pelo tempo t, em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$ tal que

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi_t(x_1, x_2, x_3)|^2 dx_1\, dx_2\, dx_3 = \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_t(x)|^2 dx = 1,$$

para todo t.

Gostaríamos que a probabilidade de encontrar a posição $x = (x_1, x_2, x_3)$ da partícula em $(a_1, b_1)\times(a_2, b_2)\times(a_3, b_3)$, no tempo t, fosse expressa por

$$P(X_t \in (a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)) = \int_{(a_1,b_1)\times(a_2,b_2)\times(a_3,b_3)} |\psi_t(x)|^2 dx.$$

A familia $\psi_t(x)$, $t \geq 0$, vai descrever a evolução temporal da particula, ou seja, para cada tempo t, vamos obter a densidade que descreve a posição espacial da partícula.

Isto de fato é possível, mas a questão é como determinar tal ψ_t. Note que desejamos encontrar ψ_t que descreve **o fenômeno físico observado na natureza** ao longo do tempo determinístico t.

Definição 1.1. Um elemento genérico em ψ em $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$, tal que $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$, será denominado de estado, ou, função de onda. Assim, ψ_t, $t \geq 0$, é o estado no tempo t.

Destacamos o fato fundamental de que, embora o objetivo seja descrever a probabilidade (da posição espacial) da partícula no tempo t estar em $(a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)$, via $\int_{(a_1,b_1)\times(a_2,b_2)\times(a_3,b_3)} |\psi_t(x)|^2 dx$, todo o procedimento que será descrito abaixo envolve a ψ_t e não a $|\psi_t|^2$. Vamos dizer de qualquer forma, de maneira vaga, que $\psi(t)$ descreve a probabilidade da posição x da partícula no tempo t. Observe que $\psi(t)$ e $\psi(t)\, e^{i\alpha t}$, $\alpha \in \mathbb{R}$, irão descrever a mesma probabilidade (quando tomarmos o módulo e elevarmos ao quadrado).

Ou seja, existe uma ambiguidade no estado $\psi \sim \psi\, e^{i\theta}$ com θ real.

No texto V é sempre uma função real.

Suponha que a partícula em análise está sob a influência de um potencial $V(x)$. Como determinar ψ_t, $t \geq 0$? A equação fundamental da $\psi_t(x) = \psi(t, x)$ na Mecânica Quântica é dada pela **equação de Schrödinger**:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2\, m} \triangle_x \psi(t, x) + V(x) \psi(t, x). \tag{1.1}$$

Ou seja, $\psi_t(x)$ é tal que para todo $x \in \mathbb{R}^3$ e todo $t \geq 0$ vale

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2\, m} \left(\frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_3^2}\right) + V(x)\, \psi(t, x).$$

O aparecimento do número complexo i na equação acima poderia parecer neste momento meio misterioso, mas em um instante vai se mostrar bastante natural.

Acima $\hbar \sim 6.626069...\, 10^{-34}$ é uma constante conhecida com a constante de Planck. Não é uma constante matemática. Esta constante é obtida para uma certa escolha de unidades de medida (Joule e segundos).

Por exemplo, se uma partícula de massa muito pequena estivesse sujeita a ação de um potencial V da forma $V(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + x_2^2$, então a correspondente equação de Schrodinger seria tal que para todo $x = (x_1, x_2, x_3)$ e todo $t \geq 0$, temos que

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(t, x) = -\frac{\hbar^2}{2\, m} \left(\frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi(t, x)}{\partial x_3^2}\right) + (x_1^2 + x_2^2) \psi(t, x).$$

Qualquer $\psi(t,x)$ que resolva a equação acima vai descrever uma possível evolução temporal desta partícula. Vários exemplos interessantes são calculados explicitamente em [149], [98] e [43].

Um estudo detalhado desta equação aparece no capítulo IV seção 3 em [282], [40] e [257].

A condição inicial seria dada por uma certa densidade inicialmente fixada $\psi_{t_0} \in \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$ que tem sua norma neste espaço de Hilbert igual a 1, ou seja, tal que $|\psi_{t_0}| = 1$. A densidade $|\psi_{t_0}(x)|^2$ descreve a estatística da posição espacial x da partícula no tempo incial t_0. Para simplificar vamos supor que $t_0 = 0$. A evolução de ψ_t, ao longo do tempo $t \geq 0$, ficará determinada de forma única a partir desta ψ_0 inicial.

Um ponto importante a destacar é que quando consideramos a densidade acima, não estamos falando de um feixe de partículas, mas a descrição de uma única partícula cujo comportamento a princípio ignoramos, mas que será descrita por esta função.

No caso em que x é unidimensional a equação de Schrödinger seria dada por

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}(t,x) = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2\psi(t,x)}{\partial x^2} + V(x)\,\psi(t,x).$$

Assim, fixada uma condição inicial $\psi_0 : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R})(dx)$, então a probabilidade de encontrar a partícula no tempo t no intervalo $[a,b]$ seria dada por $\int_a^b |\psi_t(x)|^2\,dx$, onde $\psi_t(x)$ satisfaz a equação acima. Na figura 1 o valor da área achuriada descreve esta probabilidade.

Não vamos falar neste texto de questões que envolvem conjuntamente a Teoria da Relatividade. Isto é necessário apenas quando se trabalha com partículas que tem altíssima velocidade. Por exemplo, o entendimento do comportamento dos eletrons emitidos pelos filamentos incandescentes dentro de um tubo catódico não requer uma descrição nos moldes da Mecânica Quântica Relativística. A teoria a ser descrita aqui basta, em princípio, para a sua compreensão.

Note que, aparentemente, nada se afirma sobre o momento p na equação acima (este apareceu na equação clássica de Hamilton). O momento inicial também será descrito por uma outra função densidade, via um elemento em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dp)$, onde dp é a medida de Lebesgue em $\mathbb{R}^3$. Na verdade, uma vez fixada a distribuição da posição x, dada pela condição inicial ψ_{t_0}, esta nova distribuição espacial do momento $p \in \mathbb{R}^3$ ficará determinada de maneira única a partir de ψ_{t_0} como veremos em

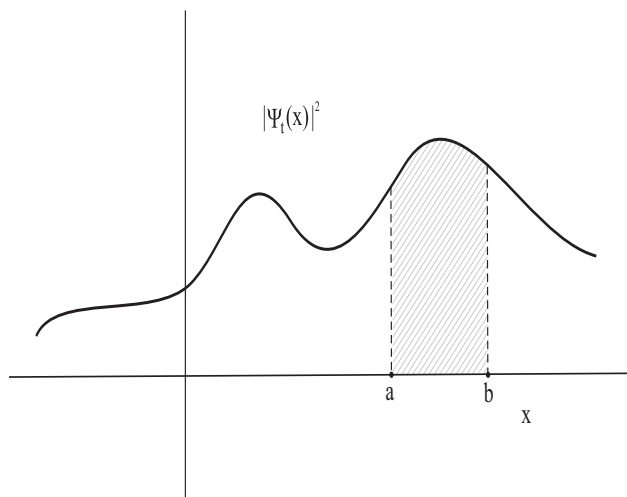



Figura 1.1:

breve.

Na Mecânica Quântica vamos associar ao Hamiltoniano inicialmente considerado $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, um operador $\mathbf{H}$ agindo em **certas funções** ψ em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$, de tal forma que $\mathbf{H}(\psi) = \phi$, onde ϕ é dado para todo $x = (x_1, x_2, x_3)$ por

$$\phi\,(x) = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\triangle_x \psi(x) + V(x)\psi(x) =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,(\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x_3^2}) + V(x)\,\psi(x).$$

A associação de $H(x,p)$ com o Operador Hamiltoniano

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\triangle + \mathcal{V} = \frac{\mathcal{P}^2}{2\,m}\, + \mathcal{V}$$

é chamado de quantização do sistema clássico definido pelo Hamiltoniano H.

Note que, em primeiro lugar, uma ψ em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$ não necessariamente é duas vezes diferenciável. No entanto, o conjunto das funções de classe C^2 é denso em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$, e, para uma ψ geral a ação do

operador $\mathbf{H}$ vai ser descrito por uma procedimento limite (na norma do espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$) a partir da expressão acima (que formalmente só faz sentido para uma função duas vezes diferenciável). Este processo envolve muitas tecnicalidades e no momento só vamos ressaltar que vale esta propriedade.

Observe também que na ausencia de potencial o operador $\mathbf{H}$ é basicamente menos o operador Laplaciano. Neste caso vamos denotar tal $\mathbf{H}$ por $\mathbf{H}_0$. O sistema clássico associado considera partículas livres que andam em linha reta, ou seja, seguindo geodésicas para a métrica Euclidiana. Vamos voltar a analisar este caso no cenário quântico mais tarde.

De forma sintetica a equação de Schrödinger afirma que para a desejada ψ_t vale a expressão

$$\mathbf{H}(\psi) = i\hbar\,\psi', \tag{1.2}$$

ou seja, para todo $t \geq 0$ e todo x, a $\psi(t,x)$ satisfaz

$$\frac{d\psi}{dt} = \psi'(t) = \frac{1}{i\hbar}\mathbf{H}(\psi(t)) = \frac{1}{i\hbar}(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\triangle + \mathcal{V})\,(\psi(t)), \tag{1.3}$$

onde $\psi(0) = \psi_0 \in \mathbb{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$, $\psi_0 : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$, foi fixada como condição inicial.

Referimos o leitor a [282] (ou, [68]) para resultados gerais envolvendo a equação de Schrodinger. Notas históricas sobre o desenvolvimento da Mecânica Quântica aparecem em [94].

Vamos agora considerar um exemplo: seja $\mathcal{V} = \frac{1}{2}\,m\,\mathcal{X}^2$, então neste caso,

$$\mathbf{H} = \frac{\mathcal{P}^2}{2\,m} + \frac{1}{2}\,m\,\mathcal{X}^2.$$

Neste caso estamos quantizando o Hamiltoniano clássico $H(x,p) = \frac{p^2}{2\,m} + \frac{1}{2}\,m\,x^2$ que descreve o oscilador harmônico.

Lembre que para qualquer constante α

$$\frac{d}{dt}e^{i\,\alpha\,t} = \frac{d}{dt}\,(\,\cos(\alpha t) + i\,\sin(\alpha t)\,) = \alpha\,(\,-\sin(\alpha t) + i\,\cos(\alpha t)\,) =$$

$$\alpha\,i(\,\cos(\alpha t) + i\,\sin(\alpha t)\,) = i\alpha\,e^{i\,\alpha\,t}.$$

Ora,

$$\psi(t,x) = (\frac{m}{\pi\,\hbar})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\,x^2}{2\,\hbar}}\; e^{-i\,\frac{1}{2}t} = (\frac{m}{\pi\,\hbar})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\,x^2}{2\,\hbar}}\,(\,\cos(-\frac{1}{2}t) + i\,\sin(-\frac{1}{2}t)\,)$$

é tal que $\frac{d}{dt}\,\psi(t,x) = (\frac{m}{\pi\,\hbar})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\,x^2}{2\,\hbar}}\,(-i\,\frac{1}{2})\,e^{-i\,\frac{1}{2}t}$.

Note que

$$\frac{d}{dx}\frac{d\;\psi(t,x)}{dx} = (\frac{m}{\pi\,\hbar})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\,x^2}{2\,\hbar}}\; e^{-i\,\frac{1}{2}t}\;[-\frac{m}{\hbar} + \frac{m^2\,x^2}{\hbar^2}\,].$$

Vamos agora calcular $\frac{1}{\hbar\,i}\,\mathbf{H}\,(\psi)$, que resulta em

$$\frac{1}{i\hbar}(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{d^2}{d^2\,x}\,\psi(t,x)\,) + \frac{1}{i\hbar}\,\frac{1}{2}\,m\,x^2\,\psi(t,x) = (\frac{m}{\pi\,\hbar})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\,x^2}{2\,\hbar}}\,(-i\,\frac{1}{2})\,e^{-i\,\frac{1}{2}t}.$$

Observamos então que vale a equação $\frac{1}{\hbar\,i}\,\mathbf{H}\;\psi(t,x) = \frac{d}{dt}\psi(t,x)$.

Assim, concluímos que neste caso $\psi(t,x) = (\frac{m}{\pi\,\hbar})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\,x^2}{2\,\hbar}}\; e^{-i\,\frac{1}{2}t}$ é solução da equação de Schrödinger para $\mathcal{V} = \frac{m}{2}\,\mathcal{X}^2$. Tal evolução temporal ψ_t, $t \geq 0$, corresponde a condição inicial $\psi(0,x) = (\frac{m}{\pi\,\hbar})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\,x^2}{2\,\hbar}}$.

A densidade da distribuição de probabilidade da posição x da partícula no tempo $t \geq 0$ é dada por $|\psi(t,x)|^2 = (\frac{m}{\pi\,\hbar})^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\,x^2}{\hbar}}$ (que por acaso não depende de t).

Retornando ao caso geral, afirmamos que a solução que descreve a posição espacial da partícula será então descrita por uma curva $\psi(t) = \psi_t$ parametrizada por $t \geq 0$ no espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$. Na verdade a evolução ao longo do tempo deveria estar sempre na esfera unitária de $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$, ou seja, $B(1) = \{\psi \in \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$, tal que $|\psi| = 1\}$. Isto de fato ocorre pela própria estrutura da equação de Schrödinger como vamos ver a seguir.

A equação acima, se não fosse pelo termo $\frac{1}{i\hbar}$, lembraria a equação da difusão.

A solução $\psi_t = \psi(t)$ que satisfaz $\psi' = \frac{1}{i\hbar}\,\mathbf{H}(\psi)$, e a condição inicial ψ_0 no tempo $t = 0$, pode ser descrita, em princípio, de forma simples [296] para $t \geq 0$ através de

$$\psi(t) = e^{t\,\frac{1}{i\hbar}\,\mathbf{H}}(\psi_0).$$

Note que

$$e^{t\,\frac{1}{i\hbar}\,\mathbf{H}}(\psi_0) = e^{-t\,i\,\frac{1}{\hbar}\,\mathbf{H}}(\psi_0).$$

A função de onda no tempo $t \geq 0$, obtida através da ação do exponencial do Hamiltoniano $\mathbf{H}$, denominada ψ_t, é determinada pela condição inicial ψ_0. A expressão $|\psi_t(x)|^2$ vai descrever no tempo t a probabilidade de encontrar a partícula em uma certa região A atraves do valor $\int_A |\psi_t(x)|^2 \, dx$.

O valor médio da posição da partícula no tempo t seria

$$\int x |\psi_t(x)|^2 dx.$$

Note que como $\mathbf{H}$ é auto-adjunto então o operador de evolução temporal $e^{-t \, \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}}$, $t \geq 0$, é tal que para cada t fixo ele é unitário. Desta forma, como $\langle \psi_0, \psi_0 \rangle = 1$ e $\mathbf{H}$ é autoadjunto, então $\langle e^{\frac{-i}{\hbar} \mathbf{Ht}} \psi_0, e^{\frac{-i}{\hbar} \mathbf{Ht}} \psi_0 \rangle = 1$. Assim, para todo $t \geq 0$ temos que $|\psi_t|^2$ descreve a densidade de uma probabilidade em $\mathbb{R}^3$.

Após o explicado acima, acreditamos que ficou mais claro agora o papel do i na equação de Schrödinger $\mathbf{H}(\psi) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$. De forma explícita: se $\mathbf{H}$ fosse limitado, então para todo x e $t \geq 0$ temos que

$$\psi_t(x) = e^{\frac{-t\,i}{\hbar} \mathbf{H}} \psi_0(x) = \sum_0^\infty \frac{1}{n!} [\left(\frac{-i\mathbf{H}\, t}{\hbar} \right)^n \psi_0](x).$$

Em geral o operador $\mathbf{H}$ que devemos considerar aqui não é limitado, e, é necessário expressar o que dissemos acima de outra forma (ver seção 2.20), mas, entendemos que, neste momento, nossa liberdade poética é justificavel por razões didáticas.

Considere um sistema com massa muito pequena que se encontra no regime quântico. Suponha que o potencial clássico associado fosse $V(x_1, x_2, x_3) = x_1^2 + 7x_2^3$. Seu Hamiltoniano quantizado associado seria o operador autoadjunto $\mathbf{H} = \frac{\mathcal{P}^2}{2\,m} + \mathcal{X}_1^2 + 7\mathcal{X}_2^3 = \frac{1}{2m} \mathcal{P} \circ \mathcal{P} + \mathcal{X}_1 \circ \mathcal{X}_1 + 7\mathcal{X}_2 \circ \mathcal{X}_2 \circ \mathcal{X}_2$.

Fixada uma condição inicial ψ_0, a sua evolução temporal $t \geq 0$, é dada por

$$\psi_t = e^{\frac{-i\,t}{\hbar} (\frac{\mathcal{P}^2}{2\,m} + \mathcal{X}_1^2 + 7\mathcal{X}_2^3)} \psi_0.$$

Se o potencial fosse $V(x_1, x_2, x_3) = x_1\, x_3$ teríamos de enfrentar o problema de escolher entre o Hamiltoniano $\frac{\mathcal{P}^2}{2\,m} + \mathcal{X}_1\, \mathcal{X}_3$ e $\frac{\mathcal{P}^2}{2\,m} + \mathcal{X}_3\, \mathcal{X}_1$. Lembre que em geral os operadores podem não comutar. Questões como estas são o objeto da próxima seção. No presente caso não haveria

problema pois é fácil ver que $\mathcal{X}_3\,\mathcal{X}_1 = \mathcal{X}_1\,\mathcal{X}_3$. Na próxima seção vamos abordar questões relacionadas a este assunto.

Observamos que se ψ_t satisfaz a equação de Schrödinger, entao $\overline{\psi_t}$ satisfaz a equaçao de Schrödinger com tempo invertido

$$\mathbf{H}(\overline{\psi}) = -i\hbar\frac{\partial\overline{\psi}}{\partial t}.$$

É importante separar aquelas propriedades básicas que provêm do fenômeno físico (observadas, direta ou indiretamente, na natureza através de experimentos) daquelas que podem ser deduzidas matematicamente destas. Assim, vamos enunciar ao longo do texto nove postulados (que devem ser entendidos como as propriedades que devemos assumir da "Física"do problema) que irão aparecer na medida da sua conveniência.

Destacamos aqui o fato que não existe consenso entre os físicos sobre um conjunto mínimo e consistente de postulados para a Mecânica Quântica. Alguns destes Postulados não são sujeitos a comprovação através de experimentos. Eles apenas estabelecem as fundações de uma teoria cujas consequencias tem sido comprovadas em sua maior parte através de diversos experimentos realizados ao longo de várias décadas. O sentido da palavra Postulado no presente texto é apenas aquele de enunciar uma afirmação que não é derivável matematicamente, mas que é necessário assumir para que o modelo matemático a ser estabelecido descreva o fenômeno físico observado (através de experiências). A formulação matemática precisa capturar estas peculiaridades.

O autor gostaria de esclarecer que os postulados apresentados aqui podem nem mesmo ser um conjunto minimal de postulados. Por exemplo, como veremos na segunda parte do texto, alguns postulados da primeira parte poderão ser deduzidos de um postulado mais fundamental (enunciado por exemplo via o Teorema Espectral).

Nosso objetivo é tão somente permitir o entendimento da formulação matemática dos fenômenos descritos pela Mêcânica Quântica. Uma certa intuição do que acontece no fenômeno físico é sem dúvida muito útil e importante. Mas, este não é o foco principal do presente texto.

POSTULADO 1. *Suponha que uma certa partícula (que é regida pelas Leis da Mecânica Quântica) é descrita no tempo* $t = 0$ *pela densidade* $|\psi_0(x)|^2$, *onde* $1 = |\psi_0| = \sqrt{\int_M |\psi_0(x)|^2\,dx}$.

Então existe uma família ψ_t *indexada por* $t \geq 0$, *com* $|\psi_t| = 1$, *denominada estado (ou função de onda) no tempo* t, $\psi_t : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$, *tal que probabilidade de encontrar a partícula num conjunto* $C \subset \mathbb{R}^3$ *no tempo* t *é dada por*

$$\int_C |\psi_t(x)|^2 dx = \int_C |\psi(t,x)|^2 dx.$$

Se a partícula esta sob a ação de um potencial V *(independente de* t*), então* $\psi(t,x)$ *satisfaz a equação de Schrödinger correspondente* (1.1) *com a condição inicial* ψ_0.

Note que $\psi(t,x)$ e $\psi(t,x)\, e^{ic(t,x)}$ descrevem a mesma probabilidade (quando para um t fixo tomamos o módulo ao quadrado $|\psi(x)|^2$). Se para um dado t vale que $\psi_t(x) = a e^{i\,c}$ dizemos que c é a fase associada e a a amplitude da onda. Como veremos em breve a fase desempenha um papel fundamental na interferencia entre distintos estados.

Podemos considerar em um certo tipo de problema que, inicialmente, no tempo 0, a partícula estava colocada num certo ponto $x_0 \in \mathbb{R}^3$. Desta forma a condição inicial na equação de Schrödinger seria $\psi_0 = \delta_{x_0}$, ou seja, a delta Dirac em x_0 (uma idealização matemática que definimos precisamente na seção 1.14). A condição inicial não seria mais um elemento em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$ mas sim uma distribuição, ou, também chamada de função generalizada (na seção 1.14 vamos elaborar sobre este conceito). A δ_{x_0} representa um "densidade"que não possui dispersão.

Desta forma a evolução temporal seria dada por ψ_t, $t > 0$, que satisfaz no sentido de distribuição

$$\psi'(t) = \frac{1}{i\hbar}\mathbf{H}(\psi(t)), \quad \psi(0) = \delta_{x_0}.$$

Neste caso, a densidade probabilistica do momento p no tempo 0, ficaria sem sentido como veremos. Este fato está associado ao Princípio da Incerteza.

Na verdade na Mecânica Quântica uma "partícula"localizada no ponto x_0 é descrita, mais precisamente, pelo que se vai chamar de pacote de ondas (vamos preferir, em geral, considerar um caso particular, que é o assim chamado pacote Gaussiano centrado em x_0), este sim, um elemento em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^3)(dx)$, e que será apresentado na seção 1.7. A esta "partícula"vamos poder associar o conceito de posição "média"e

momento. O conceito de velocidade vai aparecer mais tarde (mas de uma forma um pouco distinta do esperado).

O leitor pode encarar a questão da interpretação do sentido da densidade do estado da seguinte forma: se colocarmos a partícula no ponto x_0, várias vezes seguidas sob a ação do mesmo sistema descrito por $\mathbf{H}$, ela poderá evoluir ao longo do tempo de distintas maneiras. Assim, num tempo fixado t não poderemos dizer de forma determinística onde ela está. Mas se colocarmos, digamos, mil vezes a partícula na mesma posição x_0, e a seguir observarmos a sua posição no tempo t, o número de vezes n_t que ela está em $(a_1, b_1) \times (a_2, b_2) \times (a_3, b_3)$ será tal que aproximadamente

$$\frac{n_t}{1000} \sim \int_{(a_1,b_1)\times(a_2,b_2)\times(a_3,b_3)} |\psi_t(x)|^2 dx.$$

Na Mecânica Quântica, de forma completamente diferente da Mecânica Clássica, não vai se determinar o comportamento individual de uma partícula, mas sim, a estatística do conjunto de soluções.

Em experiências em laboratório se consegue liberar através de um aparelho uma partícula por vez. A maneira como o aparelho está preparado determina o estado (digamos ψ). Se liberamos várias vezes a partícula sob a ação do mesmo aparelho, a estatística da sua colisão com um objeto fixado (uma placa sensível), será descrita pela densidade $|\psi(x)|^2$.

A necessidade da descrição probabilística da posição da partícula segue da nossa ignorância "determinística"(para tentar prever o seu comportamento). No entanto, a teoria afirma que não existe ignorância "estatística".

A estrutura conceitual da Mecânica Quântica é intrinsicamente aleatória. Atómos radioativos, mesmo que preparados da mesma forma em laboratório, decaem aleatoriamente no tempo precisamente de acordo com as previsões probabilísticas da Mecânica Quântica ([19]).

Um dos primeiros experimentos em laboratório onde foram obtidos resultados que estão em concordancia com a Teoria da Mecanica Quantica foi o experimento de Stern–Gerlach. Uma sintética exposição do assunto pode ser encontrada na seção 5.13 de [17].

Seria natural pensar que, numa certa determinada vez em que colocamos a partícula em uma posição x_0, a sua evolução temporal seria

descrita por um caminho continuo em $\mathbb{R}^3$. Algo semelhante a uma trajetória amostral de um movimento Browniano. Afirmamos que do ponto de vista da Física esta concepção não está correta. Fixado um tempo t, se faz uma medição da partícula neste instante, e, ela tem uma certa estatística. Isto é tudo.

Na medida em que o sistema descrito por $H(x, p)$ é considerado com uma massa maior e maior, e se as distâncias forem muito grandes (e ainda uma certa proporção entre elas) nos afastamos mais e mais da Mecânica Quântica (ver [250], [307] e [7]). Observa-se no fenômeno físico que diminui mais e mais a votatilidade da partícula. Este tópico esta descrito aqui nas seções que consideram o chamado limite semiclássico que, num certo sentido, significa assumir que a massa e as distâncias envolvidas estão ficando maiores e maiores (chegando ao nível dos objetos macroscópicos). Observamos aqui que na verdade esta questão envolve uma análise mais complexa do que supor apenas isto. Este tópico será abordado na seção 2.14. Nestas considerações estamos supondo sempre que está mantida a forma do Hamiltoniano, ou seja, o potencial V não muda.

No trabalho [195] o autor destaca e explica porque quando se toma na "Mecânica Quântica"o limite em $\hbar$ indo a zero (questão rodeada de polêmica científica) não se determina o mundo da "Mecânica Clássica". Referimos o leitor para [246], [166], [90], [123], [221], [137], [169] e [351] para considerações e resultados matematicamente interessantes sobre o assim chamado limite semiclássico da Mecânica Quântica. No texto vamos tocar neste tópico em alguns momentos (por exemplo, antes da definição 1.28).

Um pouco antes da definição 1.4 mostramos um exemplo onde ao tomar o limite da massa $m \to \infty$ obtemos um resultado que faz sentido do ponto de vista clássico. Note que neste caso este limite semiclássico irá considerar apenas estados estacionários (conceito a ser introduzido em breve).

Para um certo tempo fixado t, a probabilidade espacial ψ_t vai descrever no limite semiclássico um comportamento coletivo de soluções [21]. Estamos sendo um pouco ambíguo aqui porque na equação de Hamilton se necessita fixar uma posição e um momento inicial, mas isto pode ser corretamente equacionado de outra forma (via pacote de ondas Gaussiano). Observamos que só quando a massa cresce e fica a nível macroscópico, que volta a ter sentido o conceito de velocidade (como a

conhecemos na Mecânica Clássica).

Quando a condição inicial ψ_0 não é δ_{x_0}, mas sim uma função em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$, então estaremos analisando um caso em que a própria posição inicial da partícula não é determinística. Ou seja, ela tem uma certa distribuição de posição inicial descrita pela densidade $|\psi_0(x)|^2$, onde $1 = |\psi_0| = \sqrt{\int_M |\psi_0(x)|^2 \, dx}$.

O formalismo acima se estende de forma natural a $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)(dx)$. Este elemento $\psi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$ é o que chamamos uma função de onda em $\mathbb{R}^n$, ou, um estado em $\mathbb{R}^n$. Dizemos que está normalizada se ψ tem norma neste espaço de Hilbert igual a 1.

Um dos objetivos das próximas seções é esclarecer o que corresponde na Mecânica Quântica à posição $x = (x_1, x_2, x_3, .., x_n)$ (que usualmente se considera na Mecânica Clássica). O operador $\mathcal{X}_j$, $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$, vai desempenhar o papel da coordenada x_j da posição x da partícula clássica.

Vamos analisar também em breve o que corresponde na Mecânica Quântica ao momento $p = (p_1, p_2, p_3, .., p_n)$ da Mecânica Clássica. O operador $\mathcal{P}_j$, $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$, onde $\mathcal{P}_j(\psi) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j}$ vai desempenhar o papel da coordenada p_j do momento clássico p.

Definição 1.2. É usual chamar $U(t) = e^{-t\, i\, \frac{1}{\hbar}\, \mathbf{H}}$ de propagador, ou, operador de evolução, associado ao gerador infinitesimal $-\, i\, \frac{1}{\hbar}\, \mathbf{H}$.

É fácil ver que $U(t)$ satisfaz a propriedade de semigrupo (ver seção 4.3 in [20]): dados $s, t \geq 0$, temos que

$$U(t)\, U(s) = U(t + s).$$

Dados dois estados ϕ e φ (com norma igual a 1) é natural na Mecânica Quântica entender que $< \phi, \varphi >$ é um número complexo mas seu módulo $| < \phi, \varphi > |$ descreve num certo sentido o quanto um é similar ao outro. Se eles são ortogonais $| < \phi, \varphi > | = 0$, mas, se por acaso eles são iguais $| < \phi, \varphi > | = 1$. Se $| < \phi, \varphi > |$ é próximo de 1 dizemos que os estados ϕ e φ são coerentes. Ainda, se $| < \phi, \varphi > |$ é próximo de 0 dizemos que eles não são coerentes (ou, que são descoerentes). Um fenômeno bastante investigado é o estudo de diversos processos que levam a que dois estados ϕ, φ que eram inicialmente coerentes se tornam descoerentes. Por exemplo, em certos casos ϕ e φ são coerentes mas, eventualmente, a evolução dinâmica de φ, segundo o Hamiltoniano $\mathbf{H}$,

faz com que $e^{-t\,i\,\frac{1}{\hbar}\,\mathbf{H}}(\varphi)$ e ϕ se tornem mais e mais descorentes a medida que $t \to \infty$. Referimos o leitor a [82] onde um certo caso é tratado e relacionado com o Teorema Ergódico Quântico de Von Neumann (ver [342] e [236]).

Destacamos aqui o fato que a equação de Schrödinger (que é uma equação diferencial parcial de segunda ordem linear) conduz de maneira natural a um estudo de autovalores e autovetores de $\mathbf{H}$. De fato, suponha que $\psi(t,x)$ que é uma solução de

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(t,x) = \mathbf{H}\psi(t,x),$$

seja escrita, via separação de variáveis, como $\psi(t,x) = c(t)\,\psi(x)$.

Obtemos assim, substituindo a expressão na equação de Schrödinger, e, a seguir, derivando em t

$$i\hbar\, c'(t)\psi(x) = c(t)\,\mathbf{H}(\psi)(x).$$

Logo existe uma constante λ tal que

$$\lambda = \frac{i\hbar\, c\,'(t)}{c(t)} = \frac{\mathbf{H}(\psi)(x)}{\psi(x)}.$$

Desta forma obtemos que $c(t) = e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda\, t}$, para to $t \geq 0$, e, ainda que $\mathbf{H}(\psi) = \lambda\psi$, para todo x.

Assim, tal $\psi(t,x) = e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda\, t}\,\psi(x)$, onde ψ é autovetor de $\mathbf{H}$ associado ao autovalor λ, descreve uma classe "especial"de soluções da equação de Schrödinger com condição inicial ψ.

Se ψ_0 não é autofunção de $\mathbf{H}$, de qualquer forma, $\psi_t = e^{\frac{-t\,i}{\hbar}\mathbf{H}}\psi_0$ descreve a evolução temporal do estado inicial ψ_0 ao longo do tempo $t \geq 0$.

Um estudo matematicamente rigoroso da equação $\mathbf{H}(\psi) = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\triangle + \mathcal{V}(\psi) = \lambda\psi$ é apresentado ao final de [220] (ver também capitulo IV seção 3 de [282] ou [68]).

O conjunto dos autovalores λ de $\mathbf{H}$, e mais geralmente o espectro deste operador, desempenha um papel muito importante na Teoria (ver seção 11 em [220] para um estudo detalhado do espectro deste operador). Referimos o leitor a seção 9.4 em [53] para o cálculo de autovalores e autofunções em diferentes exemplos.

Vamos mostrar mais tarde na seção 2.1 que (sob certas hipóteses) o conjunto dos valores do espectro do operador autoadjunto **H** está contido na imagem do Hamiltoniano clássico $H(q,p)$ associado. Em particular os pontos de espectro pontual e contínuo de **H** são sempre reais (ver seção 2.1).

Note que o operador Hamiltoniano $\mathcal{P}^2\psi = -\hbar^2 \frac{d^2}{d^2x}\psi$ (o caso em que $V=0$ e $m=1$), agindo em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}([0,2\pi])(dx)$, é tal que para cada n natural, vale que $\psi(x) = e^{i\,n\,x}$ é autofunção em $\mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}([0,2\pi])(dx)$ associada ao autovalor $\hbar^2\,n^2$. A função $\cos(nx)$ também é autofunção associada ao autovallor $\hbar^2\,n^2$.

Definição 1.3. Um estado inicial ψ é dito estacionário para **H** se $U(t)(\psi) = \psi_t$, é tal que para todo $t \geq 0$, e, para todo x, vale

$$|\psi(x)|^2 = |\psi_t(x)|^2.$$

Ou seja, se ψ_t determina a mesma densidade que ψ para todo $t \geq 0$.

Por exemplo, se $\mathcal{V} = \frac{m}{2}\,\mathcal{X}^2$, sabemos que

$$\psi(t,x) = \left(\frac{m}{\pi\,\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\,x^2}{2\,\hbar}}\; e^{-i\,\frac{1}{2}t}$$

satisfaz a equação de Schrödinger. Note que neste caso

$$\psi(0,x) = \left(\frac{m}{\pi\,\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\,x^2}{2\,\hbar}}$$

define um estado inicial estacionário.

Note que $|\psi(0,x)|^2 = \left(\frac{m}{\pi\,\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{x^2}{\frac{\hbar}{m}}}$ determina uma distribuição de probabilidade Gaussiana fixa que tem média zero e variância $\frac{\hbar}{2m}$. Observe que se a massa m for grande então a variância será pequena.

Voltando ao caso geral quando $\mathbf{H}(\varphi_n) = \lambda_n\,\varphi_n$, $n \in \mathbb{N}$, note que para n fixo, independente de t, temos que $\psi_t = e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda_n\,t}\,\varphi_n$ determina a mesma distribuição de probabilidade que φ_n. Ou seja, como caso particular, as funções $|\psi_{3.1}(x)|^2 = |\psi_{7.2}(x)|^2$ definem a mesma densidade de probabilidade. Concluímos assim que para n fixo, se $\mathbf{H}(\varphi_n) = \lambda_n\,\varphi_n$, então φ_n define um estado inicial estacionário para a evolução temporal da equação de Schrödinger.

Sendo assim, dado $\mathbf{H}$, para encontrar estados estacionários, devemos então buscar $\psi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$ e $\lambda \in \mathbb{R}$ tais que $\mathbf{H}(\psi) = \lambda\,\psi$

Suponha que $\mathbf{H}$ seja da forma

$$\mathbf{H} = \sum_n \lambda_n \, P_{\varphi_n},$$

onde os φ_n (de norma 1) formam um conjunto completo enumerável (note que nem sempre isto ocorre) e os λ_n são reais. Por convenção sempre indexamos os autovalores em ordem crescente

$$\lambda_0 \, \leq \, \lambda_1 \, \leq \, \lambda_2 \, \leq \, ... \, \leq \, \lambda_n \, < \, ...$$

Estes autovalores vão corresponder a níveis de energia do Hamiltoniano quântico. Ou seja, no presente caso, a medição da energia de um estado só poderá dar como resultado um destes autovalores do operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$. Isto será mais bem explicado na seção 1.3. No caso do operador $\mathbf{H}$ ter espectro contínuo a situação é mais complexa e uma medição vai resultar num elemento do espectro de $\mathbf{H}$ (detalhes na seção 2.1).

Sendo assim, obtemos a forma geral da função de onda

$$\psi(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \, e^{\frac{-i}{\hbar}\, \lambda_n \, t} \, \varphi_n(x),$$

onde φ_n é o autovetor associado a λ_n e $\alpha_n \in \mathbb{C}$. A condição inicial $\psi_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \, \varphi_n$, determina os valores α_n, $n \in \mathbb{N}$. Observe que estamos assumindo neste momento que $\mathcal{V}$ é tal que qualquer elemento no espaço de Hilbert possa ser expresso como uma soma $\sum \alpha_n \varphi_n$.

Uma expressão mais geral como a descrita acima não é estacionária.

Note que $\psi(t, x) \, = \, \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \, e^{\frac{-i}{\hbar}\, \lambda_n \, t} \, \varphi_n(x)$ está normalizada. Isto porque para todo t temos $|\psi_t| \, = \, \sqrt{\sum_{n=0}^{\infty} |\alpha_n|^2}$.

Desta forma para qualquer t vale que

$$\int \, |\psi_t(x)|^2 dx = 1.$$

Se o Hamiltoniano $\mathbf{H}$ definido acima esta agindo no toro de dimensão n, ou, em uma variedade diferenciável compacta M, então, de fato, pode-se mostrar que (sob conidições razoáveis sobre V) existe um conjunto orthonormal completo de autofunções.

Note que estamos sendo um pouco imprecisos aqui. O estado dado por $\sum \alpha_n e^{\frac{-i}{\hbar}\lambda_n t}\varphi_n$ poderia ser um elemento em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$ que não tem norma 1. É usual falar do estado definido por um genérico ϕ como aquela obtido a partir de $\frac{1}{|\phi|}\phi$, ou seja, após ser normalizado. Isto será feito no texto em várias situações sem ser mencionado.

Um dos resultados importantes que mostraremos mais tarde (seção 2.1) é o seguinte:

Teorema 1.1. Seja $V(x)$ uma função contínua em $\mathbb{R}^d$ satisfazendo $V(x) \geq 0$, e $V(x) \to \infty$ com $|x| \to \infty$. Então

1. $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + \mathcal{V}$ é auto-adjunto
2. $\sigma(\mathbf{H})$ consiste de autovalores isolados $\{\lambda_n\}_{n=0}^{\infty}$, com $\lambda_n \to \infty$, quando $n \to \infty$.

   Ou seja, $\mathbf{H}$ *é da forma*

$$\mathbf{H} = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n},$$

onde os φ_n *formam um conjunto ortonormal completo enumerável.*

Este Teorema permite exibir uma grande classe de exemplos em que o espectro é constituído apenas por autovalores e estes são em quantidade enumerável. Isto acontece por exemplo para o oscilador harmônico.

Os autovalores λ_n, $n \in \mathbb{N}$. descrevem os possiveis valores de energia deste Hamiltoniano que podem ser obtidos via medição (ver seção 1.3). A palavra "Quanta"tem o sentido de quantidades discretas. Neste caso os λ_n, $n \in \mathbb{N}$, seriam os possíveis níveis de energia λ_n **que poderiam resultar de uma medição** (conforme seção 1.3). Medições são feitas através de aparelhos em laboratórios. Por exemplo, se pode medir a energia de uma partícula quântica.

O Hamiltoniano $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{x^2}{2}$, que corresponde a $V(x) = \frac{x^2}{2}$, se enquadra nas hipóteses do último Teorema acima. Conforme veremos na seção 1.6 os autovalores do correspondente operador quantizado $\mathbf{H} = \frac{\mathcal{P}^2}{2m} + \frac{\mathcal{X}^2}{2}$ são $\lambda_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\frac{1}{\sqrt{m}}$, $n = 0,1,2,...,n,...$, e assim apenas estes valores podem surgir de medição da energia de um estado. Note que $\lambda_{n+1} - \lambda_n = \hbar\frac{1}{\sqrt{m}}$.

Observamos que a medida que a massa m cresce o espaçamento entre os níveis de energia diminui. Neste sentido o limite semiclássico seria considerar $m \to \infty$ e desta forma o espaçamento tenderia a zero. Isto faz muito sentido em função do fato que na Mecânica Clássica (em princípio o limite da Mecânica Quântica quando a massa é muito grande) existe um continuo de possiveis níveis de energia.

Definição 1.4. Caso exista o menor autovalor, a autofunção associada a este autovalor é denominada de ”ground state”(ou, estado fundamental).

As outras autofunções - estados - são consideradas mais excitadas.

No cenário clássico os valores da energia varrem um contínuo de possibilidades, ou seja, os valores de $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$. Note que estes valores estão sempre acima do mínimo de V. No caso do Teorema acima os valores de energia seriam os possiveis autovalores λ_n (contido nos valores da imagem de H como veremos).

Dado um potencial $V : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ de classe C^∞ e o correspondente $\mathbf{H}$ suponha que λ seja um autovalor e $\varphi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ a associada autofunção. Isto é para todo x

$$-\frac{\hbar}{2\,m}\frac{d^2\varphi(x)}{d^2x} + V(x)\varphi(x) = \lambda\varphi(x).$$

Assim,

$$\frac{\hbar}{2\,m}\frac{d^2\varphi(x)}{d^2x} = (V(x) - \lambda)\,\varphi(x).$$

Se existir um ponto x onde $\frac{\hbar}{2\,m}\frac{d^2\varphi(x)}{d^2x} = 0$, então a menos que $\varphi(x) = 0$ teremos que λ está na imagem de V. Desta forma, neste caso, os valores da energia estão dentro da imagem de V. Assim, valores de V e autovalores do operador de Schrödinger estão relacionados. Este fato será descrito de forma mais elaborada e com muitos detalhes na seção 2.2.

Dado um potencial $V : [a,b] \to \mathbb{R}$ periódico, ou seja $(V(a) = V(b))$, e de classe C^∞, então existe um conjunto ortonormal completo de autofunções periódicas $\varphi_n : [a,b] \to \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}$ para o operador $\mathbf{H}$. Uma maneira de se obter isto é a seguinte: o operador $\mathbf{H}$ tem inverso compacto $\mathbf{G}$ e assim se pode utilizar aqui o Teorema Espectral para o operador compacto $\mathbf{G}$ a fim de indiretamente obter o conjunto orthonormal enumerável completo $\varphi_n, n \in \mathbb{N}$ (e correspondentes autovalores λ_n para o

operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$ (ver seção 8.3 e Theorem 2.105 pagina 204 em [105] ou [83]).

O espectro de $\mathbf{H}$ quando V periódico é analisado por exemplo na seção 1.4.1 em [219].

Neste caso os autovalores de $\mathbf{H}$ podem assumir valores que não estão entre o máximo e o mínimo de V.

O conjunto enumerável dos autovalores β_n do operador compacto $\mathbf{G}$ se acumula em zero quando $n \to \infty$. Desta forma existe um número infinito de autovalores $\lambda_n = \frac{1}{\beta_n}$ para $\mathbf{H}$ e eles convergem a infinito. Este problem é tratado via função de Green no Corolário 2 página 116 do Cap. IV em [176]. Observamos que em [176] as condições de fronteira para as autofunções $\varphi_n : [a,b] \to \mathbb{R}$ são gerais (por exemplo da forma $\varphi_n(a) = 0 = \varphi_n(b)$) mas não exatamente periódicas da forma $\varphi_n(a) = \varphi_n(b)$). De qualquer forma os mesmos princípios gerais podem ser aplicados no caso periódico. Em [245] na expressão (1.3.2) da seção 1.3 as condições periódicas de fronteira são contempladas como caso particular.

O mesmo ocorre para o operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$ correspondente a $V : M \to \mathbb{R}$ quando M é variedade Riemanniana compacta (sem bordo).

Estas questões unidimensionais estão relacionadas ao Problema de Sturm Liouvile (num intervalo $[a,b]$) e são descritas com muitos detalhes em [176] e também por J. Bellissard na seção 1.5 pagina 555 de [352]. Por exemplo, as autofunções tomam valores reais (ver 2.5 na página 102 de [176]) e os autovalores formam um conjunto enumerável (ver 2.6 página 103 e Cor. 4 página 117 em [176]). Referimos também o leitor a [83] para outros detalhes sobre estas considerações.

A autofunção φ_0 associada menor autovalor λ_0 do operador $\mathbf{H}$ (ver seção 11.5 em [220]) satisfaz é claro a equação

$$\mathbf{H}(\varphi_0) \,=\, -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\triangle(\varphi_0) + \mathcal{V}(\varphi_0) \,=\, \lambda_0 \varphi_0.$$

Assim, $\varphi_t = e^{\frac{-i}{\hbar}\lambda_0\, t}\varphi_0$ descreve a evolução desta condição inicial que é estacionaria.

Denote por φ_0^m a solução para cada m distinto de $\mathbf{H}(\varphi_0^m) \,=\, [\,-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\triangle + \mathcal{V}\,](\varphi_0^m) \,=\, \lambda_0 \varphi_0^m$

No caso unidimensional a autofunção associada ao menor autovalor é única e estritamente positiva. No item 3) da seção 1.6 onde apresentamos vários exemplos o caso específico de potencial V periódico e as

autofunções de **H** será analisado com mais detalhe. O leitor interessado em mais detalhes pode encontrá-los na proposition 2.9 chapter 8 in [333] ou em [220].

Em [318] o autor (que é um matematico expert no assunto de limite semiclássico) explica que no caso de um eletron a equação

$$i\,\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t}(t,x) = -\frac{\epsilon^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2 \psi(t,x)}{\partial x^2} + V(x)\,\psi(t,x)$$

é aquela obtida reescalando todos os parametros físicos da equação de Schrodinger (massa, carga do eletron, constante de Plank, etc.). Este ϵ é uma constante "dimensionless", ou seja, uma constante matemática sem atributos de grandezas como metros, segundos, etc... Assim, o comportamento clássico "deveria"emergir quando ϵ vai a zero assumindo a premissa básica que a Mecânica Clássica descreve sistemas que possuem escalas de energia-tempo muito maiores que $\hbar$.

Mais precisamente, para t fixo, a distribuição de probabilidade de $|\psi_t(x)|^2$ - onde ψ_t satisfaz a equação de Schorodinger acima com ϵ variável - deveria descrever, de alguma forma, quando $\epsilon \to 0$, um sistema mecânico clássico.

Mas uma análise completa e geral da questão, segundo o autor, ainda não está totalmente contemplada em termos matemáticos (ver [124] para maiores detalhes).

Observação: No caso de V periódico a análise do limite semiclássico quando $m \to \infty$ afirma que a probabilidade descrita pela densidade $|\varphi_0^m|^2(x)dx$ vai se concentrar nos mínimos do potencial V. Esta afirmação está matematicamente fundamentada em vários casos e referimos o leitor a [168] [311] [312], [132], [193], [194], [135] e [173] para a prova destes resultados. Observe que do ponto de vista físico faz sentido que o limite do estado quantico de mínima energia, quando $m \to \infty$, vá determinar soluções no menor nível de energia para o Hamiltoniano clássico. Observamos que embora em [173] (e em outras das referencias acima mencionadas) os autores falem em $\hbar \to 0$, ou $\epsilon \to 0$, o resultado também pode ser lá enunciado alternativamente como $m \to \infty$.

Ao fim do exemplo 1 na seção 1.6 vamos discutir com mais detalhes algumas questões básicas sobre limites semi-clássicos. Outro ponto de vista sobre o limite semiclássico - associado a equação de Hamilton-Jacobi - vai aparecer na seção 1.11.

Questões interessantes que relacionam a possível descoberta de um certo Hamiltoniano especial (tal que seus autovalores satisfaçam certas propriedades determinadas) e a Hipótese de Riemman aparecem em [41], [71] and [34]

Note que para obter a densidade da posição do estado ψ_t, t fixo, nos basta $|\psi_t|^2$. O papel e a necessidade de se tratar o estado ψ_t, t fixo, como uma função que toma valores complexos, no entanto, está associado ao seu caráter de onda e sua sucetibilidade à interferência. Vamos elaborar sobre isto.

Suponha que

$$\mathbf{H} = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n}.$$

Se por acaso o estado inicial fosse $\psi_0 = a_2\varphi_2 + a_7\varphi_7.$, então,

$$\psi_t = \alpha_2 \, e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_2 \, t} \, \varphi_2 + \alpha_7 \, e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_7 \, t} \, \varphi_7$$

vai definir a distribuição de probabilidade em x, via $|\psi_t(x)|^2$, que vai variar dependendo de t. Assim, não seria um estado estacionário.

Suponha ainda que t está fixo, e, que seja possível construir um aparato de tal forma que a partícula sob a ação do Hamiltoniano $\mathbf{H}$ selecione no tempo t um estado fixo (com norma 1), digamos, $e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_2 \, t} \, \varphi_2$. Então, a densidade na variável x observada seria dada por

$$|\varphi_2(x)|^2.$$

Suponha que t está fixo, e, que agora construimos um novo aparato, similar ao anterior, mas de tal forma que a partícula sob a ação do Hamiltoniano $\mathbf{H}$ selecione o estado (com norma 1) $e^{\frac{-i}{\hbar} \lambda_7 \, t} \, \varphi_7$. Então, a densidade na variável x observada seria dada por

$$|\varphi_7(x)|^2.$$

Um fato surprendente na Mecânica Quântica é que as distintas possibilidades de probabilidade se interferem entre si! **Esta interferência poderia se dar de muitas formas distintas, mas a que realmente ocorre na Natureza é aquela que é a mais natural em termos da estrutura subjacente de espaço vetorial**. Mais exatamente, suponha que contruíssemos um terceiro aparato que se utiliza dos outros dois anteriores, que não privilegia em excesso nenhum dos dois, mas que permite a seleção de partículas sob as duas situações.

Pode ocorrer uma combinação do dois estados. Obteríamos assim um estado mixto. Suponha que $a_2, a_7 \in \mathbb{C}$ são tais que a função resultante tenha norma em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ igual a 1, ou seja, que

$$|a_2\, e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda_2\, t}\, \varphi_2 + a_7\, e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda_7\, t}\, \varphi_7\,| = 1.$$

Ao se fazer uma medição deste novo estado, a densidade em x observada no tempo t no fenômeno físico em consideração, é dada por

$$|\; [\, a_2\, e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda_2\, t}\, \varphi_2(x)\,] \,+\, [\, a_7\, e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda_7\, t}\, \varphi_7(x)\,]\; |^2 \qquad (*).$$

O caráter da soma

$$[\, a_2\, e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda_2\, t}\, \varphi_2(x)\,] \,+\, [\, a_7\, e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda_7\, t}\, \varphi_7(x)\,] \qquad (**),$$

é exatamente como aquela obtida através da soma de duas funções de ondas,

$$[\, a_2\, e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda_2\, t}\, \varphi_2(x)\,] \quad \text{e} \quad [\, a_7\, e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda_7\, t}\, \varphi_7(x)\,] \qquad (***),$$

que se superpõem. Note como podem ser distintos os possiveis valores da norma da soma ao variarmos apenas t. Se num certo tempo t e num certo ponto x as parcelas estivessem positivamente alinhadas, por exemplo,

$$[\, a_2\, e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda_2\, t}\, \varphi_2(x)\,] \,=\, 0.5\, e^{-0.3i},$$

e

$$[\, a_7\, e^{\frac{-i}{\hbar}\,\lambda_7\, t}\, \varphi_7(x)\,] \,=\, 0.4\, e^{-0.3i}$$

a soma das parcelas seria máxima. Desta forma a probabilidade de encontrar a partícula perto deste ponto x no tempo t seria grande. Dizemos então que as partícula se interferem de forma construtiva.

Se, por outro lado, no tempo t e num certo ponto x as parcelas não estivessem alinhadas, por exemplo, uma igual a $0.5\, e^{-0.3i}$ e a outra igual a $0.4\, e^{(-0.3+\pi)i}$, então a soma seria bem menor. Dizemos então que as partícula se interferem de forma destrutiva.

O fenômeno que apresentamos acima (inteferencia construtiva e destrutiva) descreve o que se entende por dualidade partícula-onda.

Uma expressão do tipo (*) e que é oriunda de (**) determina muitas vezes um distribuição com muitas pequenas oscilações (grande variação

da derivada). Isto ocorre mesmo que $|\varphi_2(x)|^2$ e $|\varphi_7(x)|^2$ não possuam muitas oscilações. Uma descrição geométrica do que estamos dizendo: imagine que na figura 1.3 temos que (a) descreve o gráfico de $|a_2\,\varphi_2(x)|^2$ e (b) descreve o gráfico de $|a_7\,\varphi_7(x)|^2$. Então poderia eventualmente ocorrer em uma dada situação que (d) descreve "aproximadamente"o gráfico de (*).

Observe que sob as condições acima quando se fizer uma medição da energia vamos obter ou λ_2 ou λ_7. Quando se faz uma medição existe um colapso da indeterminação (oriunda da prévia aleatoriedade entre os possíveis eventos λ_2 ou λ_7) e se obtém apenas uma das duas possibilidades. Ao se fazer uma nova medição nas mesmas condições do aparato experimental se poderia obter de novo a mesma energia ou então a outra.

Em resumo: as distintas probabilidades individuais (em separado) se interferem quando consideramos o coletivo delas. Esta interferência se dá de uma forma análoga à interferencia de ondas num meio líquido. Note que a probabilidade é uma função matemática e não é um objeto de natureza física como, por exemplo, uma onda eletromagnética. A introdução da estrutura complexa na questão em análise é que permite neste momento expressar esta interferência de forma matematicamente simples e elegante.

Para ilustrar o problema em consideração no mundo real, apresentaremos o seguinte experimento: de um lado, temos uma fonte emissora S de partículas (elétrons, por exemplo). Cada partícula deve passar por um anteparo, que possui duas fendas, e atingir um detector D no outro lado (figura 1.2). Faremos a medição **da posição da partícula quântica ao colidir com o detector** sempre no mesmo tempo t após cada partícula ser emitida no tempo $t = 0$. Desta forma repetindo o experimento várias vezes podemos obter uma distribuição de probabilidade da posição destas colisões (sempre no mesmo tempo t após ser emitida a partícula). Referimos o leitor para a seção 1.1 em [192] para uma formulação mais precisa em termos do fenômeno físico em consideração.

Se fecharmos a fenda 2, podemos calcular a distribuição de probabilidade $P_1(x)$ de o detector ser acionado por um elétron que passou pela fenda 1 conforme figura 1.3 (a) e colidiu no ponto $x \in D$ no tempo t. A variável x descreve a posição na placa detectora. Se ψ_t descreve o estado da partícula (sob tais condições) no tempo t então $|\psi_t(x)|^2 = P_1(x)$.

Num outro experimento podemos fechar a fenda 1 conforme figura 1.3 (b)) e calcular a distribuição de probabilidade $P_2(x)$ de o detector ser acionado por um elétron que passou pela fenda 2.

Pareceria natural que a média destas duas distribuições nos forneceria a probabilidade de o detector ser acionado por um elétron que passou pela fenda 1 ou pela fenda 2 (ver figura 1.3 (c)) e colidiu no ponto x em D. De outra forma: do ponto de vista clássico a probabilidade de que uma partícula atinja o detector no tempo t é

$$P(x) = \frac{1}{2}\left(P_1(x) + P_2(x)\right)$$

onde P_1 e P_2 são respectivamente as probabilidades de a partícula atingir o detector passando pela fenda 1 ou 2, respectivamente.

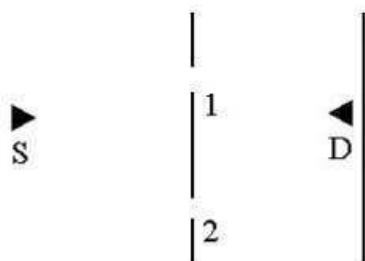



Figura 1.2: S é a fonte de elétrons e D é um detector para as partículas emitidas.

A distribuição de probabilidade (pensando classicamente) deveria ser uma curva gerada pela superposição das probabilidades via fenda 1 e 2 (ver figura 1.3). Mas não é isto que acontece no experimento. Os dados das medições físicas nos mostra que não resulta uma densidade de probabilidade da forma 1.3 (c) mas sim 1.3 d).

A distribuição que descreve as partículas que colidem no ponto x do detector no tempo t terá, na verdade, o aspecto aproximado de uma senóide com amplitude decrescente à medida que nos aproximamos dos extremos do anteparo (figura 1.3 (d)). Desta forma, obtemos os padrões de interferência entre possíveis caminhos alternativos. Observa-se uma difração na distrbuição probabilística dos dados o que revela o caráter ondulatório de partículas como elétrons (para mais detalhes sobre os

dados experimentais ver [324]). Para uma interessante discussão sobre o fenômeno da tripla fenda recomendamos o leitor a [316].

As distribuições de probabilidade (objetos matemáticos) individualizadas (ou seja, P_1 e P_2) se interferem quando colocadas em conjunto. Este experimento ilustra em termos físicos o que descrevemos antes: o carater oscilatório da distribuição da dupla fenda está em consonância com expressões do tipo (*) (**) e (***). Em termos matemáticos a estrutura de espaço vetorial (soma de números complexos) captura a essência de como corre a interferência.

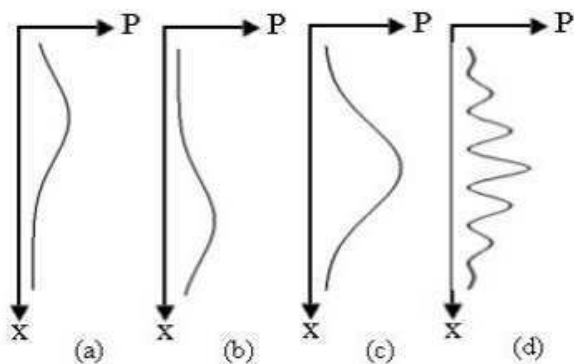



Figura 1.3: (a) $P_1(x)$. (b) $P_2(x)$. (c) $P_1(x) + P_2(x)$ (previsão clássica). (d) A distribuição que é realmente observada no caso da dupla fenda.

Na Mecânica Quântica, os modelos não são observados sem que causemos nele algum tipo de interferência. Ainda, o fato de observar simultanemente dois eventos pode resultar em algo bem mais complexo que examinar cada caso em separado.

Note o fato curioso que a possibilidade da observação por duas fendas altera, instantaneamente, o comportamento estatístico da partícula a ser emitida.

Uma discussão sobre o interferômetro de Ramsey e o fenômeno de interferencia aparece na seção 6.2 em [10].

Em [318] o autor (que é um matematico expert no assunto de limite semiclássico) explica que no caso de um eletron a equação

$$i\,\epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t}(t,x) = -\frac{\epsilon^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2 \psi(t,x)}{\partial x^2} + V(x)\,\psi(t,x)$$

é aquela obtida reescalando todos os parametros físicos da equação de Schrodinger (massa, carga do eletron, constante de Plank, etc.). Este ϵ é uma constante "dimensionless", ou seja, uma constante matemática sem atributos de grandezas como metros, segundos, etc... Assim, o comportamento clássico "deveria"emergir quando ϵ vai a zero assumindo a premissa básica que a Mecânica Clássica descreve sistemas que possuem escalas de energia-tempo muito maiores que $\hbar$.

Mais precisamente, para t fixo, a distribuição de probabilidade de $|\psi_t(x)|^2$ - onde ψ_t satisfaz a equação de Schorodinger acima com ϵ variável - deveria descrever, de alguma forma, quando $\epsilon \to 0$, um sistema mecânico clássico.

Mas uma análise completa da questão, segundo o autor, ainda não está totalmente contemplada em termos matemáticos (ver [124] para maiores detalhes).

A terminologia estados coerentes está associada a descrição do fato que estados quânticos se interferem. A medida que se considera massas maiores num determinado sistema acontece o fenômeno denominado decoerencia que significa que as interferencias começam a ficar mais fracas. Outros fenômenos também podem produzir decoerencia e isto é muito importante na Teoria da Informação Quântica. Na dissertação [181] é apresentada um discussão interessante sobre este tópico.

Uma questão natural é considerar fixado um Hamiltoniano

$$H(x,p) = \frac{|p|^2}{2m} + V(x),$$

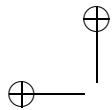
mas de massa m variável. Quando a massa é pequena o caráter ondulatório do estado se faz presente, no entanto, quando consideramos uma massa maior e maior, nos aproximamos da Mecânica Clássica, onde não se percebe a manifestação de tal fenômeno. A decoerencia é (aproximadamente) total. Como se interpreta a passagem de uma teoria a outra? Mais tarde quando tratarmos do limite semiclássico vamos abordar tal questão. Na verdade, vai ser o método da fase estacionária [255] que vai dar a justificativa matemática a tal fato. Quando a massa fica grande as oscilações ficam muito intensas e se cancelam conforme seção 2.14. Mas

então vamos necessitar assumir certas hipóteses sobre em que sentido estamos fazendo isto.

Na Mecânica Clássica a adição de uma constante V_0 ao potencial não altera as equações de Hamilton, e, assim o mesmo acontece com a evolução temporal do sistema.

Na Mecânica Quântica por sua vez a adição de uma constante ao potencial clássico, e sua consequente quantização, leva ao aparecimento (multiplicativo) de uma fase da forma $e^{\frac{-i}{\hbar} V_0 \, t}$ na função de onda ψ_t. Ou seja, $\psi_t, t \geq 0$, muda. Naturalmente, isto não causa alteração nas probabilidades de encontrar a partícula em um dada região.

Note também que a adição de uma constante V_0 ao potencial clássico, e sua consequente quantização, não altera o conjunto das autofunções do operador Hamiltoniano associado, mas, os correspondentes autovalores sao transladados por V_0.

Observamos antes que $\psi(x) = a(x) e^{i\, c(x)}$ e $\phi(x) = a(x) e^{i\, b(x)}$, onde $a(x) > 0$ e $b(x), c(x)$ são números reais, descrevem a mesma distribuição de probabilidade da partícula porque para todo x vale $|\psi(x)|^2 = a(x)^2 = |\phi(x)|^2$.

Segundo alguns autores o $c(x)$ (que descreve uma fase na onda ψ) tem relevância do ponto de medição probabilística e isto está relacionado com o que se chama de Berry phase. Não vamos elaborar sobre isto (ver [47].

A teoria descrita nesta seção pode ser extendida em sua maior parte a Hamiltonianos que possuem um potencial que depende do tempo, ou seja, da forma $H(x,p,t) = \frac{|p|^2}{2m} + V(x,t)$. Para simplificar o desenvolvimento da teoria vamos considerar no texto apenas Hamiltonianos autônomos.

Exposições matematicamente rigorosas e bem mais sofisticadas do que a descrita no presente texto podem ser encontradas em [282], [321] [17] [355], [94], [353], [157], [18] ou [277].

Em [94] o autor descreve com detalhes e de forma rigorosa alguns modelos importantes do ponto de vista da Física como os relacionados com o átomo de Hidrogenio, Potenciais Coulomb, átomos de Hélio, etc... Estes tópicos são também tratados com rigor em [18], [197] e [146].

Otimas exposições sobre Bosons, Fermions e espaços de Fock aparecem no capitulo IV section 4.5 em [282], em [14], [118], Vol. 2 de [52], [276], [275] e [17].

Questões que envolvem as desigualdades de Bell e hidden variables permitem mostrar que não se pode tratar as questões da Mecânica Quântica com o formalismo clássico da Teoria dos Processso Estocásticos. Uma bela exposição ao mesmo tempo curta e simples de tais tópicos aparece em [17] na seção 5.2.2 (ver também [18]).

Para uma descrição sumária de diferentes formalizações da Mecânica Quântica referimos o leitor a [82] and [191].

Um ponto de vista elegaante é descrever a Mecânica Quântica via Mecânica Estocástica (ver [280], [278], [263], [141], [257], [262], [147], [148], [341] e [258].

No interessante artigo "Gap Labelling Theorems for Schrödinger operators"de J. Bellissard no capitulo 12 de [352], ao lado de diversas considerações históricas, o autor discute na seção 1.3 pagina 548 a questão de considerar operadores limitados ou não no setting de C^*-Algebras. Neste trabalho também é discutida a questão: é natural considerar os problemas de Mecânica Quântica no setting de Geometria não Comutativa (ver seção 2.2) ? Referencias importantes no topico são [74], [72]and [73]. No trabalho [144] é apresentada uma breve introdução a integração não comutativa, probabilidades quasi-invariantes e sua relação com estados KMS de C^*-Algebras.

Um topico mais avançado é por exemplo a relação da Mecânica Quântica com spectral triplets (uma boa exposição pode ser encontrada por exemplo em [206] e [339]).

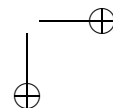
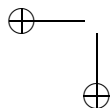
A título de ilustração, informamos que no site

http://www.instructioneducation.info/inhaltquant.html

é possivel encontrar uma sintética exposição da Mecânica Quântica acompanhada de alguns programas de computador que permitem ao leitor perceber através de figuras e simulações algumas da propriedades básicas que serão descritas de forma teorica aqui.

Em [121] são apresentados vários exemplos interessantes que podem ser ilustrados e, eventualmente, melhor entendidos via simulação em computador usando o software Mathematica.

1.2 O Comutador na Mecânica Quântica

Os observáveis clássicos são funções e os observáveis quânticos serão operadores autoadjuntos. O produto de funções (que é comutativo) será substituído no cenário quântico pela composição de operadores.

Vamos analisar algumas propriedades básicas da composição de alguns dos operadores que desempenham um papel fundamental na teoria.

Definição 1.5. O comutador de dois operadores A e B é definido como

$$[A, B] = AB - BA.$$

Assim, se A e B comutam o seu comutador é o operador zero. Note que para qualquer operador A vale $[A, A] = 0$.

Uma motivação para estudar tal questão é saber, por exemplo, se $\mathcal{X}_1 \mathcal{P}_2 = \mathcal{P}_2 \mathcal{X}_1$.

Vamos mostrar no Teorema 1.7 que se dois operadores comutam então eles são simultaniamente diagonalizáveis (usando um mesmo conunto ortnormal completo).

Lema 1.2. *Dados os operadores $A, B,$ e C, então:*
1) $[A,B] = - [B,A]$
2) $[A, B\,C] = B\,[A, C] + [A, B]\,C.$
3) $[A,\ [B, C]\,] + [B,\ [C, A]\,] + [C,\ [A, B]\,] = 0.$

Demonstração. Vamos demonstrar apenas 3).

Ora,

$$[A,\ [B, C]\,] = [A, BC] - [A, CB] = B[A, C] + [A, B]C - C[A, B] - [A, C]B =$$
$$B[A, C] - [A, C]B + [A, B]C - C[A, B] = [B, [A, C]] + [[A, B], C] =$$
$$-\,[B, [C, A]] - [C, [A, B]].$$

□

Lema 1.3. *Para quaisquer $j, k \in \{1, 2.., n\}$*

$$1)[\mathcal{X}_k, \mathcal{X}_j] = [\mathcal{P}_k, \mathcal{P}_j] = 0$$

e, ainda, para qualquer $j \in \{1, 2.., n\}$

$$2)\frac{i}{\hbar}[\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_j] = Id.$$

Finalmente, para $j \neq k \in \{1, 2.., n\}$

$$3)\frac{i}{\hbar}[\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_k] = 0.$$

Demonstração. 1) Para uma dada ψ temos

$$[\mathcal{X}_k, \mathcal{X}_j](\psi) = [\mathcal{X}_k \mathcal{X}_j - \mathcal{X}_j \mathcal{X}_k](\psi) =$$

$$x_k\, x_j\, \psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n) - x_j\, x_k\, \psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n) = 0.$$

Para uma dada ψ de classe C^2 temos

$$[\mathcal{P}_k, \mathcal{P}_j](\psi) = [\mathcal{P}_k \mathcal{P}_j - \mathcal{P}_j \mathcal{P}_k](\psi) =$$

$$\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_k \partial x_j} - \hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_j \partial x_k} = 0,$$

porque as derivadas parciais mistas comutam.

2) Para uma dada ψ temos

$$[\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_j](\psi) = [\mathcal{P}_j \mathcal{X}_j - \mathcal{X}_j \mathcal{P}_j](\psi) =$$

$$-i\hbar\{\frac{\partial}{\partial x_j}(x_j\, \psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)) - x_j \frac{\partial}{\partial x_j}\psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)\} =$$

$$-i\hbar\{[x_j \frac{\partial}{\partial x_j}\psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n) + \psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)] - x_j \frac{\partial}{\partial x_j}\psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)\} =$$

$$-i\hbar\psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)$$

3) Suponha $k \neq j$. Para uma dada ψ temos

$$[\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_k](\psi) = [\mathcal{P}_j \mathcal{X}_k - \mathcal{X}_k \mathcal{P}_j](\psi) =$$

$$-i\hbar\{\frac{\partial}{\partial x_j}(\, x_k\, \psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)) - x_k \frac{\partial}{\partial x_j}\, \psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)\,\} =$$

$$-i\hbar\{x_k \frac{\partial}{\partial x_j}\, \psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n) - x_k \frac{\partial}{\partial x_j}\, \psi(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)\,\} = 0.$$

□

O lema acima requer algum cuidado com os domínios dos operadores envolvidos, mas não vamos aqui entrar em detalhes técnicos.

Suponha que dois operadores autoadjuntos A e B comutem e que o estado tenha sido preparado em $\psi \in \mathcal{L}^2_{\mathbb{C}}(\mathbb{R}^n)(dx)$. Então os dois observáveis A e B podem ser medidos para "certos estados"ψ simultaneamente com infinita precisão. Não é possível preparar o estado ψ num laboratório de tal forma que se possa medir $\mathcal{X}_2$ e o momento $\mathcal{P}_2$ simultaneamente com infinita precisão. Isto porque $[\mathcal{X}_2, \mathcal{P}_2] \neq 0$. O sentido matematicamente exato do que estamos afirmando será explicado de forma mais apropriada na seção 1.7 (ver considerações após a Proposição 1.9).

Se dois operadores autoadjuntos A e B satisfazem $[A, B] = 0$ então é porque as medições correspondentes tem independencia - medições de um não alteram a estatística das medições do outro - (ver considerações interessantes na seção 5.12 de [17]).

Assim, não surprende que $[\mathcal{X}_1, \mathcal{X}_2] = 0$. O fato que $[\mathcal{X}_2, \mathcal{P}_2] \neq 0$ faz sentido. De fato, classicamente $p_2(t) = m\, x_2{}'(t)$ se $p(t) = (p_1(t), p_2(t), p_3(t))$, e portanto a componente 2 da velocidade $x'(t) = (x_1{}'(t), x_2{}'(t), x_3{}'(t))$, ou seja x_2', depende da posição x_2.

Lema 1.4. *Para qualquer $j \in \{1, 2.., n\}$, e, qualquer ψ*

$$\frac{i}{\hbar}[\mathbf{H}, \mathcal{X}_j](\psi) \,=\, -\frac{i\hbar}{m}\,\frac{\partial}{\partial x_j}\,\psi = \frac{1}{m}\mathcal{P}_j\,(\psi).$$

Demonstração. Note que para todo j temos que $\triangle(x_j\psi)(x) = x_j\triangle\psi(x) + 2\nabla_j\psi(x)$, onde $\nabla_j\psi = \frac{\partial\psi}{\partial x_j}$.

Ora,

$$\mathbf{H}(x_j\,\psi)\,(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle(x_j\psi)(x) + x_j\,V(x)\,\psi(x) =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,[x_j\triangle\psi(x) + 2\nabla_j\psi(x)]\,+ x_j\,V(x)\,\psi(x).$$

Desta forma, para um dado ψ temos

$$[\mathbf{H}, \mathcal{X}_j](\psi)(x) = (\,\mathbf{H}\mathcal{X}_j\,)(\psi)(x) - (\,\mathcal{X}_j\,\mathbf{H}\,)(\psi)(x) =$$

$$[\,-\frac{\hbar^2}{2m}\,[x_j\triangle\psi(x) + 2\nabla_j\psi(x)]\,+ x_j\,V(x)\,\psi(x)\,]-$$

$$x_j\,[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle(\psi)(x) + \,V(x)\,\psi(x)\,] = -\frac{\hbar^2}{m}\,\nabla_j\psi(x).$$

Portanto, $\frac{i}{\hbar}[\mathbf{H},\mathcal{X}_j] = -\frac{i\hbar}{m}\nabla_j = \frac{1}{m}\mathcal{P}_j$.

□

De forma similar se pode mostrar que:

Lema 1.5. *Para qualquer* $j \in \{1,2..,n\}$, *e, qualquer* ψ

$$\frac{i}{\hbar}[\mathbf{H},\mathcal{P}_j](\psi) \;=\; -\frac{\partial V}{\partial x_j}\,\psi.$$

Faremos agora um breve paralelo com o mundo da Mecânica Clássica. Considere o Hamiltoniano $H(x,p)$, a equação de Hamilton e suponha que $(x(t),p(t))$ descreva uma solução clássica.

Vamos mostrar que o comutador $[A,B]$ dos operadores A e B corresponde na Mecânica Clássica ao colchete de Poisson [228].

Definição 1.6. Se $f,g:\mathbb{R}^{2\,n}\to\mathbb{R}$, definimos o seu colchete de Poisson

$$\{f,g\} = \sum_{j=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial p_j}\frac{\partial g}{\partial x_j} - \frac{\partial f}{\partial x_j}\frac{\partial g}{\partial p_j}\right),$$

onde, $f(x,p) = f(x_1,...,x_n,p_1,..,p_n)$, $g(x,p) = g(x_1,...,x_n,p_1,..,p_n)$.

Pode se mostrar ([228] Ex 5 seção 3.2) que para cada $k,j\in\{1,2..,n\}$ vale $\{p_k,p_j\} = \{x_k,x_j\} = 0$, $\{x_k,p_j\} = \delta_{kj}$.

Isto corresponde, na Mecânica Quântica, a $[\mathcal{X}_k,\mathcal{X}_j] = [\mathcal{P}_k,\mathcal{P}_j] = 0$, $\frac{i}{\hbar}[\mathcal{P}_j,\mathcal{X}_j] = Id$, e, ainda, para $j\neq k$, $\frac{i}{\hbar}[\mathcal{P}_j,\mathcal{X}_k] = 0$.

Se $H(x,p):\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ é o Hamiltoniano no sistema clássico, então a dinâmica clássica pode ser descrita pelas equações de Hamilton

$$\dot{x}_k = \{H,x_k\}, \qquad \dot{p}_k = \{H,p_k\},\;\; k\in\{1,2..,n\}.$$

De fato, por exemplo, para cada $k\in\{1,2..,n\}$

$$x_k' = \{H,x_k\} = \sum_{j=1}^{n}\left(\frac{\partial H}{\partial p_j}\frac{\partial x_k}{\partial x_j} - \frac{\partial H}{\partial x_j}\frac{\partial x_k}{\partial p_j}\right) = \frac{\partial H}{\partial p_k}.$$

A expressão $\frac{p_k}{m} = x'_k = \{H, x_k\}$ é semelhante a que foi obtida acima

$$\frac{1}{m}\mathcal{P}_k \,=\, \frac{i}{\hbar}[\mathbf{H}, \mathcal{X}_k]\,.$$

Ainda, $p'_k = \{H, p_k\} = -\frac{\partial V}{\partial x_k}$, corresponde a afirmação: para qualquer ψ

$$\frac{i}{\hbar}[\mathbf{H}, \mathcal{P}_k](\psi) \,=\, -\frac{\partial V}{\partial x_k}\,\psi.$$

Desta forma se percebe que a quantização do colchete de Poisson corresponde ao comutador de operadores.

Note que os operadores $\frac{\mathcal{P}^2}{2\,m}$ e $\mathcal{V}$ não comutam.

Desta forma, não se pode afirmar que $e^{\frac{\mathcal{P}^2}{2\,m}+\mathcal{V}} = e^{\frac{\mathcal{P}^2}{2\,m}}\; e^{\mathcal{V}}$.

Observe ainda que o operador $\frac{\mathcal{P}^2}{2\,m} + \mathcal{X}_2\,\mathcal{P}_2$ não é autodjunto.

Referimos o leitor a [170] para algumas considerações interessantes relacionadas com os tópicos descritos acima.

Ao final da seção 2.16 vamos abordar a relação entre $\{\,.,.\,\}$ e $[\,.,.\,]$ no limite semi-clássico $\hbar \to 0$.

Uma apresentação extensa e excelente sobre questões envolvendo a análise de problemas não-comuativos aparece em [187].

1.3 Observáveis, valor esperado e o operador momento

No caso de uma certa partícula ser descrita de forma probabilística por uma densidade $|\psi(x)|^2$, ou seja, a probabilidade de encontrá-la numa região A é dada por

$$\int_A |\psi(x)|^2\,dx,$$

observamos que as regiões onde $|\psi(x)|^2$ é grande são aquelas que temos mais chance de encontrá-la. Mesmo assim, é claro que se for muito muito pequeno o volume de uma região B em que os valores $|\psi(x)|^2$ são grandes, a integral $\int_B |\psi(x)|^2\,dx$ poderá ter valor pequeno, ou seja será pequena probabilidade de encontrar a partícula em B.

Na análise que de qualquer fenômeno de natureza aleatória é natural tentar descobrir o comportamento médio associado. Por exemplo, suponha que a posição espacial de uma partícula sob a ação da equação de Schrödinger seja descrita por (x_1, x_2, x_3) no tempo t via $\psi_t \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$.

Podemos estar interessados em saber o comportamento médio da sua coordenada x_2 no tempo t. A expressão

$$\int x_2 \|\psi_t(x_1, x_2, x_3)\|^2 \, dx_1 \, dx_2 \, dx_3,$$

descreve de forma analítica esta informação.

Este valor será denominado posteriormente de valor esperado no tempo t da variável clássica x_2 para a densidade $\|\psi_t(x_1, x_2, x_3)\|^2$. Observe que

$$\int x_2 \|\psi_t(x_1, x_2, x_3)\|^2 \, dx_1 \, dx_2 \, dx_3 \; = < \mathcal{X}_2 \, \psi, \, \psi > .$$

Se, por exemplo, o valor de $\|\psi_t(x_1, x_2, x_3)\|^2$ é muito grande perto do ponto (4.3, 7.1, 2) $\in \mathbb{R}^3$ em comparação com os outros pontos de $\mathbb{R}^3$, ou seja a densidade está muito concentrada em (4.3, 7.1, 2), então a integral acima vai ficar perto do valor 7.1.

Definição 1.7. Um operador autoadjunto A agindo no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ será chamando de observável. Vamos denotar de valor médio (ou valor esperado) da partícula descrita por $\psi \in \mathcal{H}$ sob o observável A a expressão

$$E(A)_\psi = < A >_\psi = < \psi, A \, \psi > .$$

No caso geral, o observável A pode ter o espectro constituído por parte contínua e pontual (autovalores).

Como A é autoadjunto, este valor $< \psi, A \, \psi >$ será sempre um número real como já vimos na seção anterior.

Note que o o valor esperado de um A geral está sempre atrelado a uma distribuição espacial oriunda do estado ψ fixado.

Por exemplo, se $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$, e, $A = \mathcal{X}_2$, então, para uma dada fixada ψ_t

$$< \mathcal{X}_2 >_{\psi_t} = < \psi_t, \, \mathcal{X}_2(\psi_t) > = \int x_2 \|\psi_t(x_1, x_2, x_3)\|^2 \, dx_1 \, dx_2 \, dx_3 \, .$$

Uma pergunta natural é: quais são as propriedades da função de váriavel t, dada por $< \mathcal{X}_2 >_{\psi_t}$, que se pode obter a partir do fato que ψ_t satisfaz a equação de Shrodinger?

Na Mecânica Clássica os observáveis são funções $f(x, p)$. Por exemplo, podemos estar interessados na evolução da coordenada x_2 do

sistema mecânico governado por um certo Hamiltoniano clássico $H(x,p)$. Neste caso, $f(x,p) = x_2$. Podemos estar eventualmente interessados na evolução da coordenada p_3 deste sistema clássico; assim, seria natural considerar $f(x,p) = p^3$. Se considerarmos o observável clássico $f(x,p) = p_1^2+p_2^2+p_3^2$, então estaríamos observando o módulo ao quadrado do vetor momento. E assim, por diante. Mais exatamente, se

$$(x(t), p(t)) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t), p_1(t), p_2(t), p_3(t))$$

satisfaz a equação de Hamilton com condição inicial $(x_0, p_0) \in \mathbb{R}^6$, então, por exemplo, se $f(x,p) = x_2$, teremos que $x_2(t)$, descreve ao longo do tempo a evolução dinâmica da segunda coordenada da partícula. Ainda, se $f(x,p) = p_1^2 + p_2^2 + p_3^2$, então $p_1^2(t) + p_2^2(t) + p_3^2(t)$, descreve ao longo do tempo a evolução dinâmica do módulo ao quadrado do momento da partícula.

Na Mecânica Quântica vamos trabalhar com a densidade da probabilidade da posição espacial x (ou do momento) da partícula. Não será possivel dizer de forma determinística que no tempo t a partícula estará num determinado ponto. Se a partícula no tempo t tem distribuição caracterizada por ψ_t então seu valor médio de momento $\mathcal{P}_3$ será descrito por

$$< \mathcal{P}_3 >_{\psi_t} = < \psi_t, \, \mathcal{P}_3 \, (\psi_t) > =$$

$$\int \psi_t(x_1, x_2, x_3) \, \overline{[-i\hbar \, \frac{\partial}{\partial x_3} \psi_t(x_1, x_2, x_3)]} \, dx_1 \, dx_2 \, dx_3 \, .$$

O valor acima será um número real. Destacamos aqui o fato que foi (de certa forma) inevitável, como vimos, o uso dos números complexos na formulação da equação de Schrödinger. Mas quando vamos calcular o valor esperado de um observável obtemos sempre números reais que é o que se esperaria. Ou seja, ao calcular médias voltamos ao "nosso bom mundo real". Num certo sentido, mais próximo, ao "nosso conhecido mundo clássico".

A introdução dos números complexos na teoria se deve principalmente a necessidade de se produzir uma apropriada e elegante descrição do fenômeno da interferencia (como foi descrito na seção 1.1). Na verdade, existem formulações que dispensam a estrutura complexa e os mesmos resultados são obtidos mas por outros princípios (ver seções 1.11 e 2.18).

O oscilador harmônico corresponde ao Hamiltoniano $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\,w^2\,x^2}{2}$.

O correspondente operador $\mathbf{H}$ será

$$\phi(x) \to \; -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{d^2}{dx^2}\,\phi(x) + \phi(x)\,\frac{m\,w^2\,x^2}{2}\,.$$

Os autovalores são os números da forma $\lambda_n = (n+\frac{1}{2})\,\hbar\,w,\; n = 0,1,2,...$

Vamos mostrar em breve que o ground state (associado ao autovalor $\lambda_0 = \frac{1}{2}\,\hbar\,w$) do oscilador harmônico será da forma $\phi_0 = A\,e^{\frac{-x^2}{\alpha}}$, onde $\alpha = \frac{2\,\hbar}{m\,w}$. Escolhemos a constante A de tal fomma que $|\phi_0| = 1$

O valor esperado do Hamiltoniano $\mathbf{H}$ em ϕ_0 é a energia total do estado ϕ_0.

Assim, ϕ_0 sob a ação de tal Hamiltoniano tem energia total

$$< \frac{\mathcal{P}^2}{2\,m} >_{\phi_0} + < \mathcal{V} >_{\phi_0} =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,A^2 \int e^{-\frac{x^2}{\alpha}}\,\frac{d^2}{dx^2}\,(e^{-\frac{x^2}{\alpha}})dx \;+ A^2 \int e^{-2\,\frac{x^2}{\alpha}}\,\frac{m\,w^2\,x^2}{2}\,dx =$$

$$\frac{\hbar^2}{2\,m\alpha} + \frac{m\,w^2\alpha}{8} = \frac{1}{2}\hbar\,w.$$

Se nosso objetivo fosse observar o momento ao quadrado de $\phi_0 = A\,e^{\frac{-x^2}{\alpha}}$, então os possíveis resultados (ver Postulado 2 a seguir) poderiam atingir qualquer número não negativo (o espectro de $\mathcal{P}^2$ é a reta real não negativa). O valor médio das observações seria

$$< \mathcal{P}^2 >_{\phi_0} = \frac{\hbar^2}{\alpha}.$$

Como vimos antes, o espectro do operador $\mathcal{X}_j,\, j \in \{1,2,.,n\}$ contém toda a reta real. $\mathcal{X}_j$ não possui autovalores.

Assim o operador autoadjunto $\mathcal{X}_j$ não possui um conjunto ortonormal completo enumerável de autofunções.

Em qualquer caso, mesmo que o espectro não seja apenas pontual, o espectro do operador $\mathbf{H}$ vai desempenhar um papel muito importante na Mecânica Quântica.

No caso unidimensional, se o observável for $\mathcal{X}$, então estaremos analisando a posição espacial do estado.

A álgebra dos observáveis deve ser encarada como uma versão não comutativa da álgebra das funções. A função real $x \to x_3^2$ vai corresponder a $\mathcal{X}_3^2$, as funções reais aos operadores autoadjuntos, o Hamiltoniano clássico H a $\mathbf{H}$, etc...

Uma questão fundamental na teoria é o que se pode obter de uma medição física de um sistema quântico. O próximo postulado trata disto.

POSTULADO 2. *Os observáveis em Mecânica Quântica são descritos por operadores autoadjuntos A. Uma medição do observável A sobre um estado ψ vai dar como resultado um autovalor, ou mais geralmente, um elemento do espectro de A.*

Suponha que medição seja descrita por $A = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n}$, onde os φ_n formam um conjunto ortonormal enumerável completo, e, os autovalores correspondentes são denotados $\lambda_n \in \mathbb{R}$. Neste caso o espectro é constiuído pelo conjunto dos autovalores. Assuma que o estado ψ seja descrito por $\psi = \sum \beta_k \varphi_k$, $\beta_k \in \mathbb{C}$. Preparando o aparelho que fará a observação da mesma forma e em se fazendo várias medições a frequencia do aparecimento um determinado autovalor λ_k é descrita pela probabilidade $|\beta_k|^2$.

A palavra medição acima tem um sentido de algo que é medido por uma aparato físico. Nao é uma terminologia matemática.

Por exemplo se A for o Hamiltoniano $\mathbf{H}$, então este observável, ao ser medido sobre uma partícula que está no estado ψ, vai resultar em algum autovalor de $\mathbf{H}$, o que vai corresponder a um certo nível de energia. Existem diversos aparelhos que em laboratórios de pesquisa conseguem medir a energia de um certo estado. Se repetirmos a medição, sob as mesmas condições, poderá ocorrer um outro resultado (que será talvez um outro autovalor de $\mathbf{H}$). No exemplo do oscilador harmônico apenas os valores $\lambda_n = (n + \frac{1}{2})\, \hbar w,\ n = 0, 1, 2, ...,$ podem resultar de uma medição de energia. Neste caso apenas um conjunto enumerável de autovalores λ_n poderiam resultar da medição. Fixado o estado ψ e o observável A então a correncia de cada λ_n tem uma certa probabilidade (ver observação 1 abaixo).

Se repetirmos várias vezes estas medições o valor médio delas será $E(\mathbf{H})_\psi =< \psi, \mathbf{H}(\psi) >$ (vamos elaborar sobre isto em seguida na observação 1).

Como dissemos antes vamos mostrar na seção 2 que os conjunto dos valores do espectro do operador autoadjunto $\mathbf{H}$ está contido na imagem

do Hamiltoniano clássico $H(q,p)$ associado. Assim, o postulado acima não é assim tão surprendente.

Note que o observável posição $\mathcal{X}$ (caso unidimensional por exemplo) não possui autovalores. Uma versão mais ampla do postulado acima afirma que apenas valores do espectro podem ser obtidos como fruto de uma medição (mais tarde, na seção 2.1 e 2.2, vamos elaborar um pouco mais sobre este ponto). Neste caso, como qualquer número real está no espectro, temos que uma medição quântica da posição pode eventualmente atingir qualquer número real. Note que no experimento da fenda dupla (que mencionamos anteriormente) os valores atingidos na placa detectora (medição de posição x) podem estar em qualquer lugar (qualquer ponto da reta real associada ao detector).

Quando a partícula num tempo t colide no ponto x com a placa detectora conforme descrito no exemplo da figura 1.2, em função do seu impacto, se pode "medir"a sua energia (autovalor do Hamiltoniano $\mathbf{H}$). Os possiveis valores assim obtidos (sob certas hipóteses) estariam apenas entre um certo conjunto enumerável de possibildades (os autovalores do observável $\mathbf{H}$).

Ao passar um foton por um cristal, este ao sair, determina um estado que é uma combinação de dois estados cada um com um spin. Isto não caracteriza a ação de um operador autoadjunto. Após esta passagem, se pode medir a sua colisão com uma placa e aí teremos uma medição (que será descrito por operador autoadjunto).

A ação de um operador unitário sobre um estado resulta como output um outro estado. Sendo assim não descreve uma medição.

A questão da medição e a interferencia na medição é assunto polêmico e sujeito a diversas interpretações (por exemplo [151] aborda o assunto).

O estado deve ser encarado como uma potencialidade. Por exemplo, suponha que o estado $\psi = \beta_1(1,0) + \beta_2(0,1) \in \mathbb{C}^2$, $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{C}$ com $|\psi| = 1$, vai ser medido por um observável que correponde a um operador auto-adjunto A - uma matriz dois por dois - que tem $(0,1)$ e $(1,0)$ como autovetores associados respectivamente aos autovalores 2.1 e 3.5. Prévio à medição nada se sabe do estado. Quando se faz uma medição no laboratório os valores obtidos só poderão ser 2.1 e 3.5. Ao se fazer várias vezes a medição os distintos valores 2.1 e 3.5 irão aparecer. A frequencia - probabilidade - de aparecimento da medição 2.1 é $|\beta_1|^2$ e da medição 3.5 é $|\beta_2|^2$.

Dado um operador autoadjunto A vamos descrever de outra forma o valor $< A >_\psi$ para uma certa ψ em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Suponha que para o operador autoadjunto A, definido num espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, vale o seguinte: existem autovetores φ_n, $n \in \mathbb{N}$, de multiplicidade finita, com autovalores $\lambda_n \in \mathbb{R}$, que definem um conjunto ortonormal enumerável completo. Em geral sempre se ordena os autovalores em ordem crescente

$$\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_n \leq ...$$

Ora, ψ pode ser escrito como $\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \varphi_n$.
Assim,

$$< \psi, A(\psi) >=< \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \varphi_n, A(\sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \varphi_k) >=$$

$$< \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \varphi_n, \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \lambda_k \varphi_k >= \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n \alpha_n \overline{\alpha_n} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n |\alpha_n|^2.$$

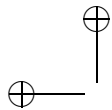
Se $|\psi| = 1$, então vale

$$1 =< \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \varphi_n, \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k \varphi_k >= \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \overline{\alpha_n} = \sum_{n=0}^{\infty} |\alpha_n|^2.$$

Observação 1: a expressão acima deve ser entendida da seguinte forma. Fixado ψ, cada valor $|\alpha_n|^2$, $n \in \mathbb{N}$, descreve a probabilidade de que a partícula descrita pelo estado ψ (com densidade de probabilidade $|\psi(x)|^2$), sob a ação do observável A, e após uma medição, resulte no valor real λ_n. Esta afirmação complementa o postulado acima e será explicitado no Postulado 5. Mais detalhes e considerações sobre este ponto aparecem após o Postulado 6 na seção 2.1. Podemos considerar então que é inerente ao problema a existencia de uma medida de probabilidade P com pesos $|\alpha_n|^2$, $n \in \mathbb{N}$. Desta forma podemos descrever o valor esperado do autovalor através da expressão $\sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n |\alpha_n|^2$. Este sentido de valor esperado descrito agora é, em princípio, conceitualmente diferente do anteriormente introduzido $< \psi, A(\psi) >$. Resulta ao fim serem os mesmos valores.

Note que como $\sum_{n=0}^{\infty} |\alpha_n|^2 < \infty$, os valores $|\alpha_n|^2$ tendem a zero quando $n \to \infty$. Assim, os níveis correspondentes aos autovalores maiores tem a tendencia de terem menor probabilidade.

Estamos afirmando (no presente caso) que os únicos possiveis resultados da observação A seriam os autovalores λ_n. Esta afirmação requer um explicação mais cuidadosa do seu sentido preciso, e, será objeto do Postulado 4, e, das considerações subsequentes ao Postulado 6 (seção 2.1).

Observe que quando é feita uma medição existe um colapso da indeterminação (oriunda esta da prévia aleatoriedade descrita pelo estado) e a medição resulta num dos possíveis autovalores do operador observável em consideração. O aparato que faz a medição no laboratório pode ser descrito de forma matemática via um certo operador autoadjunto L. O colapso do estado é um postulado que não é governado pela equação de Schrodinger.

O sentido mais concreto do colapso do estado na autofunção associada ao autovalor que foi medido pode ser melhor entendido quando se analisa teleporte em sistemas compostos (ver por exemplo seção 2.7).

Existem questões conceituais sutis sobre medições e interferencia de medições (ver por exemplo [152]) que não iremos abordar aqui.

Uma questão interessante é perguntar o que se pode dizer do "sistema quântico"(que ao ser observado colapsa num autovalor digamos) "antes"de uma medição. Referimos o leitor a [32] para a descrição de certos experimentos feitos em laboratório que tentam entender o mencionado problema.

É importante destacar a diferença entre modelar matematicamente a realidade e a realidade física em si mesma. Se L é um observável (um operador autoadjunto) e ψ um estado, não existe uma interpretação física direta para $L(\psi)$. Por exemplo, não existe sentido físico para $-\Delta\psi$. Observe entretanto que $< \psi, L(\psi) >$ nos dá o valor esperado; ainda, que os autovalores de L determinam os possíveis eventos obtidos via medição. Embora um certo operador autoadjunto L (observável) fixado permita entender o que se pode prever no mundo real, não é qualquer expressão matemática inerente ao modelo que possui uma corresponente interpretação física.

No entanto, faz sentido do ponto de vista da realidade física aplicar um operador unitário a um estado ψ e o resultado é um outro estado ϕ.

Existem outros operadores cujo input é um estado ψ e cujo output é outro estado ϕ e que tem relevância física. Por exemplo, certas experincias em laboratório são descritas por um operador projeção P_φ onde está fixado um estado φ. Um operador projeção não é unitário (não é inversível).

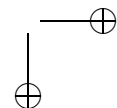
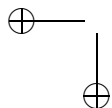
Como dissemos antes a palavra "quanta" tem o sentido de quantidade discreta. Na Mecânica Clássica uma função (observável) pode assumir um continuo de possíveis valores. Na Mecânica Quântica, por sua vez, um observável A (que satisfaz a hipótese acima, ou seja, seu espectro é constituído apenas por um conjunto enumerável de autovalores), medido para uma partícula no estado ψ, só poderá apresentar um certo conjunto enumerável de resultados (seus autovalores λ_n).

Observação 2: de forma heurística, podemos dizer que a medida que a massa m do sistema em consideração cresce temos que o espaçamento entre os autovalores (a energia) do Hamiltoniano diminui, de tal forma que quando a massa fica "grande" temos a ilusão de que todos os valores reais são possiveis para a energia (num contínuo de possibilidades do observável clássico). A formalização matemática rigorosa de tal afirmação (no entendimento do autor) não está ainda no momento disponível. No entanto, na seção de exemplos (no caso do oscilador harmonico) vamos mostrar que esta afirmação faz todo sentido.

Num átomo existem possíveis níveis de energia para os eletrons em torno do núcleo. Estes seriam descritos pelos autovalores de um certo $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle + \mathcal{V}$. Se uma partícula tem um certo nível de energia determinada, digamos λ_2, então, sua densidade de posição espacial será dada pela correspondente densidade $|\varphi_2(x)|^2$.

Inicialmente se pode pensar que o eletron estaria no estado de nível de energia mais baixo, ou seja, com energia λ_0, e, descrito pela densidade de posição $|\varphi_0(x)|^2$. Este é denominado de ground state.

Se fornecermos energia ao sistema ele poderá saltar a um nível de energia mais alto, digamos λ_1, e assim seria descrito pela densidade de posição $|\varphi_1(x)|^2$.

Estamos assim colocando o estado num numa certa particular escolha. Existem outras maneiras de se preparar o sistema num laboratório para se obter um determinado estado ψ.

Considere fixado em operador Hamiltoniano **H** que será encarado como um observável. Uma dada partícula quântica (um estado) pode exibir um comportamento misto: ter um pouco de energia λ_1 e um pouco de energia λ_3, mas suponha que apenas estes. Assim, a ψ que descreve tal partícula teria a forma $\psi = \alpha_1 \varphi_1 + \alpha_3 \varphi_3$, onde φ_1 e φ_3 designam as autofuções de **H** associadas respectivamente a λ_1 e λ_3. Desta maneira, $|\alpha_1|^2 + |\alpha_3|^2 = 1$. Após fixar o ψ, que foi preparado para estar nesta forma, é que iremos fazer a medição via o observável $A = \mathbf{H}$. Quando medimos várias vezes (estamos com um observável A fixo) a sua energia, digamos 1000 vezes, e, calcularmos o número a_{1000} de vezes que "observamos"o valor de energia λ_1, obtemos o valor aproximado

$$\frac{a_{1000}}{1000} \sim |\alpha_1|^2.$$

Um descrição interessante sobre a diferença entre medições repetidas e medições sucessivas aparece na pagina 53 na seção 4.3a em [140].

O desenvolvimento a seguir vai ilustrar o papel dos observáveis na Mecânica Quântica.

Seja $\langle \psi_t(x), x_2 \psi_t(x) \rangle = \int x_2 \|\psi_t(x)\|^2 dx$, então, usando a equação de Schrödinger e o Lemma 1.4 temos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle \psi_t, x_2\psi_t \rangle &= \langle \frac{d}{dt}\psi_t, x_2\psi_t \rangle + \langle \psi_t, x_2 \frac{d}{dt}\psi_t \rangle \\ &= \langle \frac{1}{i\hbar}\mathbf{H}\psi_t, x_2\psi_t \rangle + \langle \psi_t, x_2 \frac{1}{i\hbar}\mathbf{H}\psi_t \rangle \\ &= \langle \psi_t, \frac{i}{\hbar}\mathbf{H}(x_2\psi_t) \rangle - \langle \psi_t, x_2 \frac{i}{\hbar}\mathbf{H}\psi_t \rangle \\ &= \langle \psi_t, \frac{i}{\hbar}[\mathbf{H}, \mathcal{X}_2]\psi_t) \rangle \\ &= \frac{1}{m}\langle \psi_t, -i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial x_2} \rangle \end{aligned} \tag{1.4}$$

De forma semelhante se mostra que para qualquer $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$ vale

$$\frac{d}{dt}\langle \psi_t, x_j\psi_t \rangle = \frac{1}{m}\langle \psi_t, -i\hbar \frac{\partial \psi_t}{\partial x_j} \rangle.$$

Segue disto que

$$m \frac{d}{dt} < \mathcal{X}_j >_{\psi_t} = < -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x_j} >_{\psi_t} = < \mathcal{P}_j >_{\psi_t} .$$

Recuperamos assim, via valor esperado, uma expressão semelhante à correspondente clássica, ou seja, para qualquer $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$,

$$m x_j'(t) \,=\, m \, \frac{d}{dt} x_j(t) \,=\, p_j(t).$$

Da mesma forma, se pode mostrar que para qualquer $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$ vale

$$\frac{d}{dt} \langle \mathcal{P}_j \rangle_{\psi_t} = \frac{d}{dt} \langle \psi_t, \mathcal{P}_j(\psi_t) \rangle = \langle - \frac{\partial V}{\partial x_j} \rangle_{\psi_t}.$$

Assim recuperamos, via valor médio, também a expressão clássica em termos de colchete de Poisson $p_j' = \{H, p_j\} = -\frac{\partial V}{\partial x_j}$.

Reunindo as duas expressões, para todo t, temos que para qualquer $j \in \{1, 2, 3, ..., n\}$ vale

$$m \, \frac{d}{dt} < \mathcal{X}_j >_{\psi_t} = < \mathcal{P}_j >_{\psi_t}, \quad \text{e} \quad \frac{d}{dt} \langle \mathcal{P}_j \rangle_{\psi_t} \,=\, \langle - \frac{\partial V}{\partial x_j} \rangle_{\psi_t}.$$

Desta forma recuperamos (num certo sentido) as Leis de Newton (e a equação de Hamilton) ao tomarmos os valores médios dos observáveis envolvidos.

Assim, o que representaria a versão quantica da velocidade clássica seria o operador $\frac{1}{m} \mathcal{P}$.

Vamos generalizar as expressões acima para um operador autodjunto A qualquer.

Lema 1.6. *Seja A autoadjunto, e, ψ_t satisfazendo a equação de Schrödinger, então, para todo t*

$$\frac{d}{dt} \langle \psi_t, A \psi_t \rangle = \langle \psi_t, \frac{i}{\hbar} [H, A] \psi_t) \rangle.$$

Ou, de forma equivalente,

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle_{\psi_t} = \langle \frac{i}{\hbar} [H, A] \rangle_{\psi_t}.$$

Este resultado é conhecido como Teorema de Ehrenfest.

Demonstração.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\psi_t, A(\psi_t)\rangle &= \langle\frac{d}{dt}\psi_t, A(\psi_t)\rangle + \langle\psi_t, A(\frac{d}{dt}\psi_t)\rangle \\
&= \langle\frac{1}{i\hbar}H(\psi_t), A(\psi_t)\rangle + \langle\psi_t, A(\frac{1}{i\hbar}H(\psi_t))\rangle \\
&= \langle\psi_t, \frac{i}{\hbar}H(A(\psi_t))\rangle - \langle\psi_t, A(\frac{i}{\hbar}H(\psi_t))\rangle \\
&= \langle\psi_t, \frac{i}{\hbar}[H,A](\psi_t)\rangle.
\end{aligned}$$

□

Vamos elaborar mais sobre o resultado acima na seção 1.13.

Fazendo aqui um paralelo com a Mecânica Clássica do resultado acima lembramos que se pode mostrar ([228] Ex 6 seção 3.2) que dado $F(x,p)$, $F : \mathbb{R}^{2n} \to \mathbb{R}$, e sua evolução ao longo de uma solução da equação de Hamilton $(x(t), p(t))$, entao vale que

$$\frac{d}{dt}F(x(t), p(t)) = \{F, H\}(x(t), p(t)),$$

onde $\{,\}$ denota o colchete de Poisson.

Uma integral primeira para equação de Hamilton (para um Hamiltoniano H) é uma função F que é constante ao longo da evolução temporal $(x(t), p(t))$, ou seja, tal que $\frac{d}{dt}F(x(t), p(t)) = 0$; uma condição suficiente para isto é que $\{F, H\} = 0$.

De forma análoga, se desejamos obter um observável A tal que o valor esperado ao longo da evolução temporal descrita pela equação de Schrodinger (associada ao Hamiltonian $\mathbf{H}$) seja constante, então segue do Lema acima que basta obter A tal que $[\mathbf{H}, A] = 0$. Note que como $[\mathbf{H}, \mathbf{H}] = 0$ então o valor esperado de $\mathbf{H}$ não muda ao longo da evolução temporal do estado pela dinâmica de Schrodinger.

Como dissemos antes, o sentido físico de um determinado observável A está associado a uma medição obtida via algum aparelho. Dada uma partícula que se encontra num estado ψ, podemos medir a energia, o momento, e outras grandezas pertinentes.

Definição 1.8. A energia média de uma partícula no estado ψ sob a ação de $\mathbf{H}$ é

$$E_\psi(\mathbf{H}) =<\psi, \mathbf{H}\psi>=<\psi,\, [\frac{\mathcal{P}^2}{2\,m} + \mathcal{V}](\psi)\, > .$$

Se ψ é autofunção normalizada de $\mathbf{H}$ associada ao autovalor λ, então, $E_\psi(\mathbf{H}) = \lambda$.

O operador observável I corresponde a não observar (não medir nada).

Note primeiro que estes observáveis quânticos A envolvem conceitos que em geral possuem análogos clássicos. Quando a massa m é muito pequena devemos proceder de maneira diferente (da clássica), e assim, surge o cenário quântico. Em segundo lugar note que para calcular uma probabilidade associada ao observável A se faz necessário um estado ψ (que por sua vez envolve a posição x da partícula). Dito isto, podemos prosseguir.

Observáveis no Setting Clássico: suponha que uma densidade $f(x)$, onde temos que $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, descreve a probabilidade da posição x, mais exatamente, a probabilidade de encontrar x no conjunto C seria $\int_C f(x)\, dx \geq 0$.

A média da posição x seria $\overline{x} = \int x\, f(x) dx$.

Um observável clássico, dependente da posição x, seria uma função contínua $g(x)$, onde $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$.

Definição 1.9. O valor esperado, ou média, do observável clássico g seria

$$E_f(g) = \overline{g}_f = \int g(x)\, f(x) dx.$$

Vamos supor que o observável clássico g está fixo, e, consideramos várias possíveis densidades f. Uma possibilidade de densidade f seria, por exemplo, um $|\psi|^2$ oriundo do mundo quântico.

POSTULADO 3. *Para cada observável clássico $g(x)$, $g : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ (não necessariamente contínuo), corresponde um operador autoadjunto A com domínio denso em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$, tal que, para todo ψ em $D(A)$ vale*

$$\overline{g}_{|\psi|^2} = < \psi, A\psi > .$$

Se B é autoadjunto e $D(A) \subset D(B)$ e, para todo $\psi \in D(A)$

$$\overline{g}_{|\psi|^2} = < \psi, B\psi >,$$

então $B = A$.

Dado o observável clássico g, o associado A será denotado por Q^g. Assim, para qualquer tal $\psi \in D(A)$ vale

$$\int g(x)\,|\psi(x)|^2\,dx \;=\; \int \psi(x)\,\overline{Q^g(\psi)(x)}\,dx.$$

Por exemplo, dado $g(x) = x^2$, temos que $Q^{x^2} = \mathcal{X}^2$. Será importante considerar tal expressão para funções que não são analíticas nem mesmo continuas, como por exemplo $g(x) = I_{(-\infty,c)}(x)$, onde c é um número real. A associação para o caso de oberváveis da forma $g(x)$ será abordada num exemplo na seção 2.1 após a apresentação do Teorema Espectral.

Observáveis clássicos da forma $g(x,p)$ também podem ser quantizados. A associação ao operador quantizado $\mathcal{O}_p^W\, g$ a um dado observável clássico da forma $g(x,p)$ será feita via a quantização de Weyl na seção 2.16.

Vamos ilustrar num exemplo simples (ver [246] and [120]) o procedimento de quantização de observáveis clássicos da forma $g(x,p)$, onde $x \in [0, 2\,\pi]$ (ou, o círculo unitário S^1). A cada função $g(x,p)$ vamos associar um operador L agindo em $\mathcal{L}^2$.

Dada uma função peródica $u : [0, 2\,\pi] \to \mathbb{C}$ em $\mathcal{L}^2(dx, [0,1])$, podemos escreve-la em termos de série de Fourier (ver por exemplo [53])

$$u(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{u}(k)e^{-i\,kx},$$

onde $\hat{u}(k)$ são coeficientes de Fourier de u.

A série de Fourier da derivada de u pode ser obtida através dos coeficientes de Fourier $\hat{u}(k)$, $k \in \mathbb{Z}$, via

$$\frac{du(x)}{dx} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-i\,k)\hat{u}(k)e^{-i\,kx}.$$

Disto segue que

$$\frac{d^2u(x)}{d^2x} = -\sum_{n=-\infty}^{\infty} k^2\hat{u}(k)e^{-i\,kx}.$$

Identificamos z em S^1 com $[0, 2\,\pi)$ via $z = e^{-i\,x} = \cos(-x) + i\sin(-x)$, onde $x \in [0, 2\,\pi)$.

Assim, temos que

$$u(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{u}(k)\, z^k.$$

Seja $g : S^1 \times \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ dada, então para $\hbar > 0$, e $u : S^1 \to \mathbb{C}$ em $L^2(S^1, \mathbb{C})$ denotamos

$$Op_\hbar(g)\,(u)(z) = \sum_{k\in\mathbb{Z}} g(z, \hbar\, k)\hat{u}(k)\ z^k.$$

Assim, para cada função u obtemos uma nova função na variável z dada por $z \to \sum_{k\in\mathbb{Z}} g(z, \hbar\, k)\hat{u}(k)\ z^k$.

Isto define um operador $Op_\hbar(g)$, denominado a quantização do observável clássico $g(x, p)$:

$$Op_\hbar(g) : L^2(S^1, \mathbb{C}) \to L^2(S^1, \mathbb{C}).$$

Quando g é constante e igual a 1, então, $Op_\hbar(g)$ é a identidade.

Se $g(z, p) = V(z)$, $V : S^1 \to \mathbb{R}$, então, $Op_\hbar(g)$ é a multiplicação por V, ou seja o operador $\mathcal{V}$.

Se $g(z, p) = p$, então $Op_\hbar(g)\,(u) = i\,\hbar \frac{d\,u}{dz}$.

Se $g(z, p) = \frac{p^2}{2\,m}$, então $Op_\hbar(g)\,(u) = -\frac{1}{2\,m}\hbar^2 \frac{d^2\,u}{d^2 z}$.

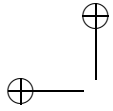
Sendo assim, se $g(z, p) = \frac{p^2}{2\,m} + V(z)$, então

$$Op_\hbar(g)\,(u)(z) = -\frac{1}{2\,m}\hbar^2 \frac{d^2\,u}{d^2 u}\,(z)\ +\ V(z)u(z),$$

que é o operador de Schrodinger.

O desenvolvimento acima mostra que é natural a associação de g ao operador $L = Op_\hbar(g)$.

Existem observáveis que são naturais na teoria mas que não são obtidos via a associação com uma $g(x, p)$.

POSTULADO 4. *Fixado o estado ψ, suponha que medição seja descrita por $A = \sum_n \lambda_n\, P_{\varphi_n}$, onde os φ_n formam um conjunto ortonormal enumerável completo, e, os autovalores correspondentes são denotados λ_n. Se o resultado obtido for um determinado λ_k que tem multiplicidade 1, então o estado ψ, imediatamente após a medição, passa a ser φ_k (colapsa)*

Considerações interessantes sobre este "colapso"aparecem na seção 5.12 de [17].

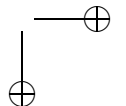
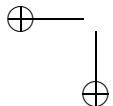
No caso em que o espaço de Hilbert tem dimensão finita o fenômeno descrito acima é descrito com detalhes em [10]. Uma interessante discussão sobre a distinção entre "agir novamente no mesmo sistema e realizar o mesmo experimento" pode ser encontrada na seção 6.1.2 do mencionado texto.

Alguns dos operadores $A = \sum_n \lambda_n P_{\varphi_n}$, que aparecem nos problemas reais físicos são tais que eventuamente um autovalor pode não ter multiplicidade 1. Neste caso o postulado correspondente é mais complexo e não vamos elaborar sobre o assunto.

Note que antes de se fazer uma observação o estado tem o potencial de, ao ser subsequentemente medido, produzir como resposta qualquer um dos autovalores do operador. Temos assim, prévio a observação, uma grande indeterminação. O estado está em "estado latente". Após a observação, ao se produzir um determinado autovalor, a nossa ignorância do resultado desapareceu. Este postulado ficará bastante natural quando analisarmos o conceito de dispersão do estado e sua relação com autovalores na seção 1.7.

O estado da partícula ψ é um elemento de $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Ele é uma "potencialidade" de possíveis eventos. É somente ao ser observado que ele produz uma "resultado". E, este, depende de qual observável A está "medindo"ψ.

Fixado um estado ψ, sob a observação de A, será natural para o seu entendimento estatístico, expressar ψ através do conjunto ortonormal completo dos autovetores de A. Se observarmos o mesmo ψ através de um outro observável B, será natural, para o seu entendimento estatístico, expressar ψ através do conjunto ortonormal completo dos autovetores de B.

Se A e B comutam, então como já dissemos certos estados ψ (os autovetores comuns) podem ser preparados de forma que se possa medir simultaneamente A e B com infinita precisão. O Teorema 1.7 irá ajudar a entender melhor tal afirmação. Em geral dados dois observáveis A e B eles não comutam (ver considerações interessantes na seção 5.12 de [17]).

O postulado acima possui uma versão mais geral que contempla qualquer operador autoadjunto mas não vamos aqui tratar deste assunto (ver [126]).

O colapso de ψ, passando instantaneamente a ser φ_k, ao se obter a medição λ_k tem aplicações interessantes em teleporte na Teoria da Informação Quântica. Isto é brevemente descrito no apêndice da seção 2.7.

Fixada uma condição inicial ψ_0, a expressão acima $\langle \psi_t, A(\psi_t) \rangle$ pode também ser escrita como

$$\langle \psi_t, A(\psi_t) \rangle = \langle e^{-t\,\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{H}}(\psi_0), A(e^{-t\,\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{H}}(\psi_0)) \rangle = \langle \psi_0, e^{t\,\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{H}}\, A\, e^{-t\,\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{H}}(\psi_0) \rangle.$$

Se denotarmos

$$A(t) = e^{t\,\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{H}}\, A\, e^{-t\,\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{H}},$$

teremos que

$$< A >_{\psi_t} = < A(t) >_{\psi_0}\ .$$

Note que $A(t)$ é autoadjunto porque $e^{t\,\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{H}}$ é unitário e A é autoadjunto.

É usual denominar o ponto de vista de considerar a evolução temporal da condição inicial via o estado ψ_t em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$, e, depois estimar o valor esperado de A de **ponto de vista de Schrödinger** (lado esquerdo). Ou seja, $\psi_0 \to e^{\frac{i}{\hbar}\,t\,\mathbf{H}}\psi_0 = \psi_t$ (que evolui é o estado), assim o gerador infinitesimal é $\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}$. Depois, dado o operador autoadjunto A calculamos no tempo t o valor $< A e^{\frac{i}{\hbar}t\,\mathbf{H}}\psi_0\,,\, e^{\frac{i}{\hbar}t\,\mathbf{H}}\psi_0 >$.

Por outro lado, é usual denominar o ponto de vista de considerar a evolução temporal $A(t)$ (um operador para cada t) do observável A de **ponto de vista de Heisenberg** (lado direito). De forma mais precisa, considere a evolução do observável $A(t)$, para uma dada condição inicial $A(0) = A$, sujeita a equação

$$-\,i\hbar\,\frac{d}{dt}A(t) = [\mathbf{H}, A(t)].$$

O gerador infinitesimal do semigrupo $A(t), t \geq 0$, **ponto de vista de Heisenberg** é o operador

$$A \to \frac{1}{\hbar}\, i\, [H, A].$$

A solução $A(t)$ da última equação pode ser expressao do forma explícita através de

$$A(t) = e^{t\,\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{H}}\,A\,e^{-t\,\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{H}}.$$

O ponto de vista de Heisenberg da mais ênfase aos operadores (e sua evolução temporal) e o de Schrödinger aos estados no espaço de Hilbert (e sua evolução temporal).

Referimos o leitor para o capitulo IV seção 3 de [282] para mais detalhes sobre a evolução temporal sob o ponto de vista de Heisenberg.

Suponha agora que $A = \sum_n \lambda_n\, P_{\varphi_n}$ e $B = \sum_m \beta_m\, P_{\phi_m}$ são dois operadores autoadjuntos que não comutam. Qual o sentido de observar A e depois B?

Dado o estado ψ, pelo Postulado 4, a medição por A resulta em um certo φ_{n_0}. A medição sob B feita após esta medição vai ter probabilidade $|c_m|^2$ de resultar em β_m se $\varphi_{n_0} = \sum_m c_m \phi_m$.

No caso em que o espaço de Hilbert tem dimensão finita o fenômeno descrito acima é descrito com detalhes em na seção 6.1.3 [10].

Dado um certo estado $\psi = a\,(0,1) + b\,(1,0) \in \mathbb{C}^2$, $a, b \in \mathbb{C}$ podemos modificá-lo via o uso de aparelhos em laboratório. Desta forma podemos preparar em laboratório um estado de um certa forma desejada. Isto é descrito de forma matemática via a ação de um operador unitário U e assim se pode obter um novo estado $U(\psi)$. Não estamos fazendo com isto uma medição. Uma medição seria descrito pela ação de um operador autoadjunto $A = \sum_{j=1}^{2} \lambda_j P_{\phi_j}$. Ao medir por A o sistema no estado ψ se obtém como resultado um autovalor de A, digamos λ_2 . O estado ψ então colapsa no autovetor associado ϕ_2. O uso de portas lógicas descritas por operadores unitários como acima é util em Informação Quântica. Uma breve descrição deste tópico aparecerá no apêndice ao fim da seção 2.7.

Da mesma forma, dado o estado $\psi \in \mathcal{L}^2(dx)$, podemos aplicar a ele um operador unitário U e assim obter $U(\psi)$. Pode-se assim preparar o sistema quântico de acordo com conveniênica e obter um $U(\psi)$ que eventualmente é útil para alguma ação subsequente.

Na Algebra Comutativa (usando o produto usual) das funções (observáveis clássicos) que tomam valores complexos isto não ocorre, ou seja, vale sempre que $f(x)g(x) = g(x)f(x)$.

A^2 não representa observar A, e depois, ao que foi obtido, observar A de novo.

Se a partícula estivesse no estado ψ, então, $E(A^2)_\psi =< \psi, A^2(\psi) >= \int \psi(x)\, \overline{A^2(\psi)(x)} dx$. Podemos considerar também funções arbitrárias envolvendo o operador observável A. Isto será de grande importância na seção 2.1 e 2.3.

O próximo postulado é uma espécie de generalização do anterior.

Um exemplo pictórico, mas interessante é o seguinte: fixado um Hamiltoniano $\mathbf{H}$ considere um estado $\psi = \sum_j \lambda_j \varphi_j$, onde os φ_j são autovetores com os distintos níveis de energia de $\mathbf{H}$ e λ_j os correspondentes autovalores. Considere agora um operador projeção que vai representar um aparato (uma espécie de filtro) que deixará passar apenas os que tem energia $\lambda_n, \lambda_{n+1}, ..., \lambda_k$ (associados respectivamente aos autovetores $\varphi_n, \varphi_{n+1}, ..., \varphi_k$). Vamos descrever o que de fato ocorre no cenário quântico através do seguinte postulado que sintetiza muitas das nossas considerações anteriores:

POSTULADO 5. *Suponha que ψ seja da forma $\psi = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda_j \, \varphi_j$. Suponha que se possa aplicar no estado inicial ψ, um "filtro"descrito por um "aparato"que deixa passar apenas $\sum_{j=n}^{k} \lambda_j \varphi_j$, ou seja a parte que corresponde aos estados que tem autovalor $\lambda_n, \lambda_{n+1}, ..., \lambda_k$.*

Se a medição resultar em um certo λ_j, $j = n, n+1, .., k$, o estado passa a ser φ_j. A probabilidade da ocorrencia de λ_j é igual a

$$\frac{|c_j|^2}{|c_n|^2 + |c_{n+1}|^2 + ... + |c_k|^2}.$$

Uma discussão interessantes sobre certos aspectos relacionados com o Postulado acima aparecem em 5.1.2 em [17].

Um foton ao passar por certos tipos de cristal se transforma em uma combinação linear de duas autofunções (aqui apareceu a projeção) em que cada uma delas corresponde a um tipo de spin. Esta não é uma medição. Um outro anteparo subsequente vai poder depois fazer uma medição em que as duas possibilidades poderão resultar como output.

O que ocorre em termos de medição quando dois operadores autoadjuntos A e B comutam? Uma discussão interessante sobre o assunto

aparece em 5.1.2 em [17]. O próximo resultado vai auxiliar neste entendimento.

Teorema 1.7. *Suponhamos que os operadores compactos autoadjuntos A e B comutem. Então existe um conjunto enumerável ortonormal completo φ_n, $n \in \mathbb{N}$, comum aos dois operadores.*

Ou seja, é possível escrever A e B da forma

$$A = \sum_n c_n P_{\varphi_n}$$

e

$$B = \sum_n d_n P_{\varphi_n}.$$

Ou seja, é possível usar um sistema comum de projetores.

Demonstração. Denote por $|\alpha_n >$ e $|\beta_n >$, $n \in \mathbb{N}$, respectivamente, os dois conjuntos enumeráveis ortonormais completos associados a A e B. Seus respectivos autovalores são denotados por a_n e b_n, $n \in \mathbb{N}$ em ordem crescente.

A idéia da prova é mostrar que para todo autovalor a_n de A, o conjunto dos autovetores associados a a_n (um subespaço vetorial N_n) é também o conjunto dos autovetores associados autovalores de B. Para obter isto mostramos que este subespaço de autovetores para o autovalor de A dado fica invariante pela ação de B. Assim, restringindo B a este subespaço (que é autodajunto como operador agindo neste subespaço) podemos usar o Teorema espectral e encontrar autovetores para B.

Lembre que para um operador A autoadjunto dados dois autovalores distintos o espaço dos correspondentes autovetores são subespaços ortogonais (mais detalhes podem ser obtidos em [222]).

Ora, para n fixo, denote por $N = N_n$ o núcleo de $(A - a_n I)$. Note que este espaço pode não ser unidimensional.

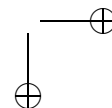
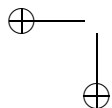
Note que como $A\,B = B\,A$, temos que, para cada n, o operador B deixa N_n invariante. De fato, seja $v \in N_n$,

$$A(B(v)) - a_n B(v) = B(A(v)) - a_n B(v) = B\,[A(v) - a_n v] \,=\, B(0) \,=\, 0.$$

Assim, $B(v)$ está em N_n.

Observe agora que a restrição de B a N_n define também um operador autoadjunto. Via o Teorema espectral aplicado a $B|_{N_n}$ podemos então encontrar um conjunto ortonormal completo de autovetores para $B|_{N_n}$.

O resultado segue de aplicar o raciocínio acima para cada N_n, $n \in \mathbb{N}$.

□

Assim, se os operadores comutam eles podem ser simultaneamente digonalizados. Os seus autovetores são comuns. Este resultado será de grande importância nas considerações que serão feitas após a Proposição 1.9.

Suponha que A e B comutem e estejam sob as hipóteses do resultado acima. Fixado um estado ψ podemos tomar um conjunto ortonormal completo de autofunções comum $\varphi_n, n \in \mathbb{N}$ e realizar a medição de $\psi = \sum_n c_n \varphi_n$ primeiro via A e depois via B. Para um determindo n fixado a probabilidade do resultado c_n (obtido via a medição A) é a mesma do resultado d_n (obtido via medição B).

A sequencia de medições primeiro A e depois B vai resultar na mesma estatística que se fosse feito primeiro B e depois A. Para mais detalhes sobre o assunto referimos o leitor a seção 6.1.3 em [10] onde a noção de testes compatíveis e incompatíveis é apresentada.

POSTULADO 6. *Uma função de um observável quântico é um observável quântico. Assim, se A é o operador observável associado ao clássico $g : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ (não necessariamente contínuo), segundo o Postulado 3, então, A^n é o correspondente a*
$g^n = \underbrace{g \times g \times ... \times g}_{n}$.

Desta forma, tomando como exemplo um observável clássico da forma $g(x)$, e seu operador associado A, então para qualquer tal $\psi \in D(A)$ vale

$$\int g(x)^2 \, |\psi(x)|^2 \, dx \; = \; \int \psi(x) \, \overline{A^2(\psi)(x)} \, dx.$$

Denotamos por Q^g o operador autoadjunto associado ao observável clássico g (uma função real).

Assim, se considerarmos uma função analítica $f(\lambda)$, vale

$$\int f(g(x)) \, |\psi(x)|^2 \, dx \; = \; \int \psi(x) \, \overline{f(Q^g)(\psi)(x)} \, dx.$$

O observável B vai agir sobre um certo estado ψ. Suponha que escolhamos um certo ψ específico. Num experimento real, é preciso prepará-lo para se obter tal ψ. Questões interessantes envolvendo este tópico

podem ser obtidas em [21]. Uma estratégia natural seria encontrar um potencial V que tivesse como ground state tal ψ. Assim, ao observarmos via o correspondente $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m} \triangle + \mathcal{V}$ um ϕ qualquer, pelo Postulado 4 obteríamos com alta probabilidade o almejado ψ. Após isto, então aplicamos o operador observável B ao resultado obtido (aplicar antes $\mathbf{H}$).

1.4 Transformada de Fourier

Será necessário para a apropriada descrição do momento na Mecânica Quântica o entendimento de algumas propriedades básicas da Transformada de Fourier.

A transformada de Fourier $\mathcal{F}$ vai agir em funções ψ em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$.

$$\psi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C} \quad \xrightarrow{\mathcal{F}} \quad \hat{\psi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}.$$

Usaremos a notação $\mathcal{F}(\psi) = \hat{\psi}$.

Uma excelente referencia para os assuntos apresentados brevemente aqui é section 3 do chapter 3 de[333] (ver também [296], [297] ou [327]). O tópico é descrito de maneira mais elementar (mas suficiente boa para o que precisamos aqui) em [53].

Vamos assumir que ψ age numa variável denotada por $x \in \mathbb{R}^n$, e, $\hat{\psi}$ age numa variável denotada por $p \in \mathbb{R}^n$

Definição 1.10. Dado $\psi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$, uma função na variável x, denotamos para cada $p \in \mathbb{R}^n$

$$\widehat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{-i\langle p,x\rangle}{\hbar}} \psi(x) dx.$$

Fica definida assim a função $\widehat{\psi} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{C}$, na variável p, que se denomina a Transformada de Fourier de ψ (mais detalhes em [297] [53] [198]).

A transformada de Fourier $\mathcal{F}$ agindo em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ preserva a norma do espaço de Hilbert. Ou seja, se $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$, então também vale que $\int |\widehat{\psi}(x)|^2 dx = 1$. Note a existência de $\hbar$ na expressão acima.

Teorema 1.8. *Teorema de Plancherel [297] [76] [300] [53]: $\mathcal{F}$ é um operador linear unitário em $\mathcal{L}^2(dx)$, i.e., preserva a norma em $\mathcal{L}^2(dx)$.*

Se ψ é uma função real par, ou seja, se para todo x real vale $\psi(x) = \psi(-x)$, então, sua transformada de Fourier é uma função real. Isto segue de fazer a mudança de coordenadas $y \to -x$ abaixo

$$\hat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{i\langle p,y\rangle}{\hbar}}\, \psi(y)\, dy = \overline{\hat{\psi}(p)}.$$

Um fato importante é o seguinte ([53] [297]): se Re $(a^2) > 0$.

$$e^{-\frac{x^2}{2a^2}} \quad \xrightarrow{\mathcal{F}} \quad (\frac{a^2}{\hbar^2})^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{a^2|p|^2}{2\,\hbar^2}}.$$

Sabe-se que para x_0 e a fixos, temos que

$$\phi(x) = \frac{1}{a\,\sqrt{2\pi}}\, e^{\frac{-(x-x_0)^2}{2a^2}}$$

é tal que $\int \phi(x)dx = 1$.

Tal ϕ é denominada de distribuição (ou densidade) Gaussiana de média x_0 e variância a.

Ainda, vale que

$$\int \phi(x)\, x\, dx = x_0$$

e

$$\int \phi(x)\,(x-x_0)^2\, dx = \int \phi(x)\,(x - [\int \phi(x)\, x\, dx]\,)^2\, dx = a^2.$$

Para $x = 0$ vale independente de a que existe um valor fixo para a integral da ϕ acima em

$$\int_{-a}^{a} \phi(x)\ dx = 0.682...$$

Esta função ϕ é conhecida com a densidade Gaussiana de média zero e variância $a > 0$. Quanto mais pequeno for a, mais concentrada em torno do zero esta a densidade. Quanto maior for o a então mais "esparramada"vai ficar a densidade ψ.

Ainda, quando $n = 1$, e fixado a, segue da expressão acima que a transformada de Fourier da densidade Gaussiana de média zero e variância ($a > 0$) é densidade Gaussiana de média zero e variância $\frac{h}{a}$. Assim, a Transformada de Fourier leva Gaussianas concentradas em torno de zero em Gaussianas esparramadas, e, vice versa. Esta é a primeira manifestação matemática do Princípio da Incerteza que será considerado em breve. Destacamos que, mais geralmente, vale que funções

muito concentradas "concentradas em torno de zero"(pouca dispersão) são levadas pela transformada de Fourier em funções "muito esparramadas em torno do zero"(grande dispersão), e, vice versa. Isto será cuidadosamente analisado em breve.

Estaremos interessados, entre outras, na função de onda

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{a\,\sqrt{2\pi}}}\, e^{\frac{-\,(x-x_0)^2}{4\,a^2}},$$

que é tal que $\int |\psi(x)|^2 dx = 1$. Assim, $|\psi(x)|^2$ é a densidade Gaussiana de média x_0 e variância (ou, dispersão) $a > 0$. Propriedades similares ao caso anterior também ocorrem.

A delta de Dirac no ponto x_0 pode ser entendida como o "limite"de uma distribuição Gaussiana com média x_0 e variância a, quando $a \to 0$.

Se A é uma matriz simétrica positiva definida $n \times n$

$$e^{-\frac{1}{2\hbar}\langle x, A^{-1}(x)\rangle} \quad \xrightarrow{\mathcal{F}} \quad (\hbar)^{\frac{n}{2}} (det A)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{2}\langle p, Ap\rangle}$$

Se $n = 3$ e $b > 0$

$$\sqrt{\frac{\pi}{2\hbar}} \frac{e^{-\sqrt{b/\hbar^2}|x|}}{|x|} \quad \xrightarrow{\mathcal{F}} \quad (|p|^2 + b)^{-1}$$

Ainda, para $a > 0$ fixo, temos que $\mathcal{F}(I_{(-a,a)}(x))(p) = c\,\frac{\sin(a\,p/\hbar)}{p/\hbar}$, onde c é constante (ver [53]).

Ver [177] para uma versão da Transformada de Fourier em variedades Riemannianas.

Definição 1.11. A adjunta de $\mathcal{F}$, que denotaremos por $\mathcal{F}^* = \mathcal{F}^{-1}$, é dada por

$$\mathcal{F}^* : \psi \to \check{\psi}(x) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{i\langle x,p\rangle}{\hbar}} \psi(p) dp.$$

Denominamos de transformada de Fourier inversa tal função $\mathcal{F}^*$. Ou seja, $\check{\psi}$ é a transformada de Fourier inversa de ψ.

Assim,

$$f(s) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{-i\langle s,x\rangle}{\hbar}} \check{f}(x) dx.$$

Note o chapéu invertido na expressão acima.

Isto significa que $\mathcal{F}^*(\check{\psi}) = \psi$. De outra forma, para qualquer ψ em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ vale que $(\mathcal{F}^* \circ \mathcal{F})(\psi) = \psi = (\mathcal{F} \circ \mathcal{F}^*)(\psi)$.

A diferença entre $\mathcal{F}$ e $\mathcal{F}^*$ está no sinal que multiplica i no termo $e^{\frac{i\langle x,p\rangle}{\hbar}}$ da integral.

Se pode considerar mais geralmente a transformada de Fourier de uma função generalizada (também chamada de distribuição) conforme será descrito na seção 1.14.

Note que para p fixo, a função $\phi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}<p,x>}$ é solução de $\mathbf{H}_0(\phi) = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle(\phi) = \lambda\phi = \frac{|p|^2}{2m}\,\phi$. A função ϕ não é autofunção de $\mathbf{H}_0$ pois não está em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ ($\int|\phi(x)|^2 dx$ não é finito). No entanto, uma combinação (integrada) de distintas $\phi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}<p,x>}$, em princípio, poderia. Queremos dizer com isto que $\psi(x) = \int g(p)\, e^{-\frac{i}{\hbar}<p,x>}\, dp$, para algum certa g, pode ser um elemento em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Em resumo, a transformada de Fourier inversa pode ser pensada como um procedimento para combinar de forma ponderada distintas "quase autofunções"de $\mathbf{H}_0$.

Note também que se tomarmos como g a delta Dirac em p_0, então, $\mathcal{F}^*\left(\delta_{p_0}(p)\right) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}<p_0,x>}$. De outra forma, no sentido de distribuições (mais detalhes na seção 1.14) temos que

$$\mathcal{F}\left(\,(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\, e^{\frac{i}{\hbar}<p_0,x>}\,\right) = \delta_{p_0}(p).$$

Algumas propriedades da transformada de Fourier são:

1) $\widehat{-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x_j}}(p) = p_j\,\widehat{\psi}(p)$

Demonstração. Vamos mostrar o resultado para $n = 1$. Suponha que ψ tenha suporte compacto e seja diferenciável. Então, via integração por partes, dado $\hbar$ e p, vale

$$\psi(x)\cos(\,(p\,x)/\hbar\,)|_{-R}^{R} = \int \psi'(x)\cos(\,(p\,x)/\hbar\,)dx\; - p/\hbar \int \psi(x)\sin(\,(p\,x)/\hbar\,)\,dx.$$

Uma fórmula similar vale para $\psi(x)\sin(\,(p\,x)/\hbar\,)$. Como $e^{zi} = \cos(z) + i\sin(z)$, quando z é real, então a fórmula desejada segue do descrito acima.

No caso $n=1$, para $\psi(x)$ vale $-i\hbar\,\widehat{\psi\,'}(p)=p\,\widehat{\psi}(p)$.

No caso n dimensional temos a expressão equivalente: para todo j

$$\widehat{\mathcal{P}_j(\psi)}\,(p)=\widehat{-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x_j}}(p)=p_j\;\widehat{\psi}(p)$$

□

2) Aplicando duas vezes o resultado acima, temos, no caso $n=1$, que para $\psi(x)\in C_0^\infty(\mathbb{R})$ vale

$-\hbar^2\widehat{\psi''}(p)=p^2\;\widehat{\psi}(p)$

3) $\mathcal{F}(\psi(x)\,e^{a\,x})=\hat{\psi}(p-\hbar\,a\,i)$.

Demonstração. Vamos demonstrar no caso $n=1$.

O resultado segue de

$$\widehat{\psi}(p)=(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\int e^{\frac{-i\,p\,x}{\hbar}}\psi(x)\,e^{ax}dx=$$

$$(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}\int e^{\frac{-i(p-\hbar\,ai)\,x}{\hbar}}\psi(x)\,dx.$$

□

As seguintes expressões seguem de mudança de variável e integração por partes [53].

5) $\widehat{x\psi}(p)=i\hbar\nabla_x\widehat{\psi}(p)$

6) $\mathcal{F}(\psi(x-a)\,)=e^{\frac{-i}{\hbar}<a\,,p>}\;\hat{\psi}(p)$.

Outra expressão equivalente a esta é $\mathcal{F}(\psi(x)\,e^{-i\,p_0\,x})=\hat{\psi}(p_0-p)$.

Como a transformada de Fourier leva densidades Gaussianas em densidades Gaussianas, aplicando a expressão acima obtemos para a,p_0 fixados que

$$\mathcal{F}(\frac{e^{\frac{-x^2}{2a^2}}\;e^{-ip_0\,x}}{\sqrt{2\pi}\,a})=c\,e^{\frac{-(p-p_0)^2}{2\frac{1}{a^2}}}.$$

A relevância deste resultado vai aparecer quando analisarmos o pacote de ondas Gaussiano [70] [308].

A partir de 6) e do conhecimento de $\mathcal{F}(I_{(-a,a)}(x))(p)$ se pode calcular facilmente $\mathcal{F}(I_{(c,d)}(x))(p)$ para qualquer intervalo real (c,d).

Definição 1.12. A função em x dada por $(f*g)(x) = \int_{\mathbb{R}^n} f(y)g(x-y)dy$ é denominada de convolução de f e g.

7) $\widehat{\phi\,\psi} = (2\pi\hbar)^{-n/2}\ \widehat{\psi} * \widehat{\phi}$

Demonstração. Note que de 3) segue que para um fixo x, a transformada na variável ξ satisfaz $\hat{\phi}(x-\xi) = \mathcal{F}(\phi(p)\, e^{\frac{i\,\xi}{\hbar}\,p})$. Disto segue

$$\mathcal{F}(\phi\,\psi)(x) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int (\phi(p)\,\psi(p))e^{\frac{-i\,p\,x}{\hbar}}\,dp =$$

$$\int (\phi(p)\,e^{\frac{-i\,p\,x}{\hbar}}\ [\int e^{\frac{i\,p\,\xi}{\hbar}}\ \hat{\psi}(\xi)\,d\xi\,]\,)\,dp =$$

$$\int \hat{\psi}(\xi)\ [\int\ e^{\frac{i\,p\,\xi}{\hbar}}\,\phi(p)\,e^{\frac{-i\,p\,x}{\hbar}}\ dp\,]\,)\,d\xi =$$

$$(2\pi\hbar)^{-n/2} \int \hat{\psi}(\xi)\,\hat{\phi}(x-\xi)\ d\xi\ = (2\pi\hbar)^{-n/2}\ \widehat{\psi} * \widehat{\phi}.$$

□

8) $\widehat{\phi * \psi} = (2\pi\hbar)^{\frac{n}{2}}\,(\widehat{\phi}\cdot\widehat{\psi})$

A demonstração deste fato é similar ao caso anterior.

9) Para qualquer $\phi, \psi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ vale

$$\langle \phi, \psi \rangle = \langle \widehat{\phi}, \widehat{\psi} \rangle.$$

Demonstração. Isto segue do fato que $\mathcal{F}$ é uma isometria em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$ e da identidade da polarização [296]

$$< \psi, \phi > = \frac{1}{4}(\,|\psi+\phi|^2 - |\phi-\psi|^2 - i\,|\phi + i\,\psi|^2 + i\,|\phi - i\,\psi|^2\,).$$

□

Propriedades análogas as descritas acima para a tranformada de Fourier valem para a Transformada inversa de Fourier. Por exemplo

10) $\mathcal{F}^*(\phi\,\psi)(x) = (2\pi\hbar)^{-n}\,[\mathcal{F}^*(\psi)\ *\ \mathcal{F}^*(\phi)]$.

Para concluir observamos que a Transformada de Fourier é uma ferramenta de fundamental utilidade e importância na análise de estados sobre $\mathbb{R}^n$, mas, que, infelizmente, não se dispõe de análogos simples que possam fazer seu papel em uma variedade diferenciável compacta qualquer.

1.5 O Momento via Transformada de Fourier

Afirmamos antes (no começo da seçao 1.3) que

$$< \mathcal{P}_j >_{\psi_t} = < \psi_t,\, \mathcal{P}_j\,(\psi_t) > =$$

$$\int \psi_t(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)\,[\frac{\partial}{\partial x_j}\ \overline{-i\,\hbar\,\psi_t}(x_1, x_2, x_3, ..., x_n)]\,dx_1\,dx_2\,dx_3\,...\,dx_n,$$

descreve a média do operador momento $\mathcal{P}_j$ ao longo do tempo.

Uma outra expressão similar pode ser obtida (usando a propriedade 1) da ultima seção) da seguinte maneira:

$$\langle \psi, \mathcal{P}_j \psi \rangle = \langle \widehat{\psi}, \widehat{\mathcal{P}_j(\psi)} \rangle = \langle \widehat{\psi}, p_j \widehat{\psi} \rangle = \int p_j |\widehat{\psi}(p)|^2 dp,$$

ou, unidimensional: $\langle \psi, \mathcal{P} \psi \rangle = \langle \widehat{\psi}, \widehat{\mathcal{P}(\psi)} \rangle = \langle \widehat{\psi}, p \widehat{\psi} \rangle = \int p |\widehat{\psi}(p)|^2 dp$.

De forma consistente com isto, se soubermos qual é exatamente a onda que descreve a posição espacial via $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, podemos, tomar sua Transformada de Fourier $\widehat{\psi} : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, e assim, obter a densidade do vetor momento p que seria dada por $|\widehat{\psi}(p)|^2$.

Neste sentido, no caso n-dimensional se sabemos qual é exatamente a distribuição da posição ψ_t, podemos, tomar sua Transformada de Fourier $\widehat{\psi}_t$, e assim, obter a distribuição da j-ésima componente do vetor momento p no tempo t, ou seja, de $\mathcal{P}_j(p)$ no tempo t.

O momento da partícula é uma grandeza que pode ser medida através de experimentos físicos (Compton scattering).

POSTULADO 7. *A probabilidade de que o momento p da partícula no tempo t esteja no conjunto C é dada por*

$$\int_C |\hat{\psi}\,(t, p)|^2\,dp,$$

onde $\psi(t, x) = \psi_t(x)$ denota o estado que descreve a probabilidade (via $|\psi_t(x)|^2$) de posição de x no tempo t.

Lembre que $\widehat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{-i\langle p,x\rangle}{\hbar}} \psi(x)dx$.

Afirmamos que se uma partícula quântica tem sua posição x descrita pela probabilidade associada a onda $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, então, sua transformada de Fourier $\hat{\psi} : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ descreve a probabilidade do seu momento. Ou seja, a informação do momento p está contida na informação da posição espacial x. Referimos o leitor a [321] para mais detalhes sobre o uso da Transformada de Fourier em Mecânica Quântica.

Dado o operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$ e uma condição incial ψ_0 se obtem via equação de Schrödinger a evolução $\psi_t = e^{-t\,i\,\frac{1}{\hbar}\,\mathbf{H}}\,\psi_0$.

Considere agora $\hat{\psi_0}$ a Transformada de Fourier de ψ_0. Esta define via $|\hat{\psi_0}(p)|^2$ a densidade do momento p no instante $t = 0$.

Observe o seguinte fato fundamental: vamos considerar

$$\widehat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{-i\langle p,x\rangle}{\hbar}} \psi(x)dx$$

para uma função ψ **tal que** $\int |\psi|^2\,dx = 1$**. Não vamos considerar a integral** $(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}} \int e^{\frac{-i\langle p,x\rangle}{\hbar}} |\psi(x)|^2 dx$

Se supusermos que a partícula quântica está posicionada no ponto x_0 e que não tem dispersão, então, devemos considerar que sua "densidade"é a delta Dirac em x_0. Como é explicado com detalhes na última seção, no sentido de distribuições, a transformada de Fourier da delta Dirac em x_0 é a função $p \to e^{-\frac{ipx_0}{\hbar}}$. Esta função não está em $\mathcal{L}^2(dp)$. Desta forma, o momento não tem uma densidade bem definida. Mas, heuristicamente, se pode pensar que o momento associado ao "estado" delta de Dirac em x_0 é descrito por $p \to e^{-i\,\frac{1}{\hbar} p\, x_0}$.

Note que $|e^{-i\,\frac{1}{\hbar} p\, x_0}|^2 = 1$ e isto "poderia" ser entendido como a descrição estatística mais "esparramada" possível do momento p. Esta manifestação radical do momento está associada - via transformada de Fourier no sentido de distribuição - a mais concentrada das possíveis descrições da posição (a delta Dirac em x_0). Esta é uma versão extrema do princípio da incerteza (ver seção 1.8).

Na seção 1.13 mostramos também que no sentido de distribuição a transformada de Fourier de $x \to e^{-i\,\frac{1}{\hbar} p_0\, x}$ é a delta Dirac em p_0. Assim, para o "estado"dado por $x \to e^{-i\,\frac{1}{\hbar} p_0\, x}$ obtemos que o momento associado é descrito pela delta Dirac em p_0.

"quantum2
2019/12/13
page 93

No trabalho [177] o autor apresenta uma versão da Transformada de Fourier em variedades Riemannianas.

Suponha que $\int x|f(x)|^2\,dx = 0 = \int p^2|\hat{f}(p)|^2\,dp$, ou seja, a média da posição e do momento da partícula descrita pelo estado f é zero. A seguinte relação entre uma função $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ e sua transformada de Fourier $\hat{f}$ é uma manifestação do assim chamado Princípio da Incerteza de Heisenberg que será abordado na seção 1.7:

$$\int x^2|f(x)|^2\,dx \int p^2|\hat{f}(p)|^2\,dp \geq \frac{\hbar}{4}\left(\int |f(x)|^2 dx\right)^2.$$

Vamos ver agora que via a Transformada de Fourier podemos quantizar distintas funções clássicas $g(p),\ g:\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$.

Por exemplo, qual operador A vai corresponder em Mecânica Quântica a $g(p)=g(p_1,p_2,p_3)=\frac{\|p\|^2}{2m}+3p_2^2\,p_3$? Isto será útil se quisermos considerar, por exemplo, a versão quântica de um Hamiltoniano da forma, $H(x,p)=\frac{\|p\|^2}{2m}+3p_2^2\,p_3+V(x)$.

Em outras palavras, dado $g(p)=g(p_1,p_2,...,p_n)$, gostaríamos de obter de uma forma bem estruturada e coerente $g(\mathcal{P}_1,\mathcal{P}_2,...,\mathcal{P}_n)$.

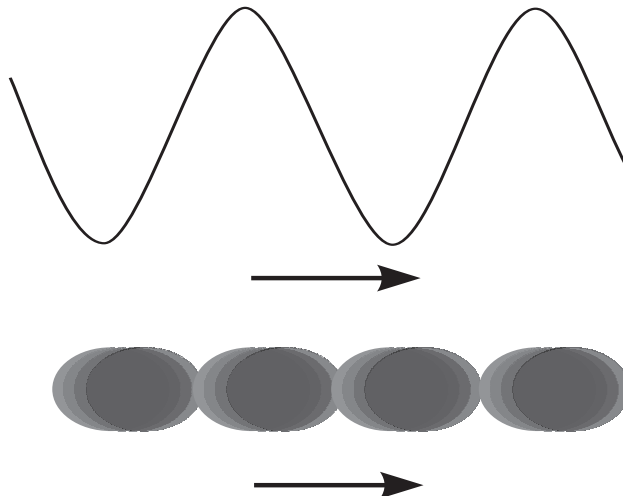



Figura 1.4: Um estado ψ tal que é quase $|\psi(x)|^2=\cos(\alpha x)$. No tom mais escuro as regiões de maior probabilidade de encontrar a partícula na posição x (Wikipedia).

De uma forma ingênua poderíamos associar a $g(p_1, p_2, p_3) = 3p_2^2\, p_3$ o operador $3\,\mathcal{P}_2^2\mathcal{P}_3$. Mas cabe a pergunta: porque não: $3\,\mathcal{P}_2\mathcal{P}_3\mathcal{P}_2$.

Bem, neste caso isto não se torna um problema porque $\mathcal{P}_2$ e $\mathcal{P}_3$ comutam (lembre que $[\mathcal{P}_2, \mathcal{P}_3] = 0$).

Problemas poderiam ocorrer se desejássemos quantizar $g(x, p) = x_3^2 p_3 = x_3 p_3 x_3$, isto porque, $\mathcal{X}_3$ e $\mathcal{P}_3$ não comutam. Mais tarde iremos tratar deste assunto quando analisarmos a quantização de Weyl na seção 2.16. Fica transparente aqui uma diferença fundamental entre o cenário clássico e quântico. O produto de funções é comutativo mas o produto (composta) de operadores não.

Via transformada de Fourier vamos poder introduzir uma quantização que descreve de forma apropriada o fenômeno observado na Natureza. Dado $g(p) = g(p_1, p_2, ..., p_n)$ em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dp)$ (satisfazendo certas condições técnicas) e ψ desejamos definir $g(\mathcal{P}) = g(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, ..., \mathcal{P}_n)(\psi)$. Note que para isto basta dizer quem é a função

$$\mathcal{F}\,(g(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, ..., \mathcal{P}_n)(\psi)\,) = \widehat{g(\mathcal{P})},$$

pois,

$$\mathcal{F}^*\,(\mathcal{F}\,(g(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, ..., \mathcal{P}_n)(\psi))\,) \;=\; g(\mathcal{P}_1, \mathcal{P}_2, ..., \mathcal{P}_n)(\psi).$$

Definimos

$$\widehat{g(\mathcal{P})(\psi)}\,(p) = g(p)\;\widehat{\psi}(p).$$

Note que este procedimento é consistente com o fato que dado $g(p) = g(p_1, p_2, p_3) = p_2$, temos que $\mathcal{P}_2(\psi)$ satisfaz

$$\widehat{\mathcal{P}_2(\psi)}(p) = \; p_2\widehat{\psi}(p).$$

Ainda, a partir do descrito acima, se $g(p) = g(p_1, p_2, p_3) = p_3^2$, então $\widehat{\mathcal{P}_3^2(\psi)} = p_3^2\,\widehat{\psi}(p)$.

Logo, $\mathcal{P}_3^2(\psi)(x_1, x_2, x_3) = \mathcal{F}^*(p_3^2\,\widehat{\psi}(p_1, p_2, p_3))(x_1, x_2, x_3)$.

Em resumo, para determinar $g(\mathcal{P})$ devemos descrever sua ação sobre cada ψ. Ora, dado ψ, se soubermos quem é $\widehat{g(\mathcal{P})(\psi)}$, obtemos $g(\mathcal{P})(\psi) = \mathcal{F}^*(\widehat{\mathcal{P}(\psi)})$. Vamos nos valer da expressão $\widehat{g(\mathcal{P})(\psi)}\,(p) = g(p)\;\widehat{\psi}(p)$.

Nosso objetivo final será encontrar uma expressão integral para o operador $e^{-i\frac{t}{\hbar}\,(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle)}$**.**

Antes disso vamos considerar agora um caso particular importante. É fácil ver que dado qualquer polinômio quadrático $g(p)$ nas variáveis

$p_1, p_2, .., p_n$, o operador $g(\mathcal{P})$ é obtido mediante a substituição de p_i por $\mathcal{P}_i$, na expressão analítica de g. Da mesma forma, por limite, uma série de potências em $p_1^2, p_2^2, p_3^2, ..., p_n^2$ pode ser aplicado a $\mathcal{P}$ e o resultado é obtido apenas substituindo os $p_1^2, p_2^2, p_3^2, ..., p_n^2$, respectivamente por, por $\mathcal{P}_1^2, \mathcal{P}_2^2, \mathcal{P}_3^2, ..., \mathcal{P}_n^2$.

Note então que

$$\widehat{\mathcal{P}^2(\psi)} = -\hbar^2 \, \widehat{\triangle(\psi)} = (p_1^2 + ... + p_n^2)\, \widehat{\psi}.$$

Finalmente, observamos que se $g(p)$ for uma função que toma apenas valores reais, então $g(\mathcal{P})$ é autoadjunto.

De fato,

$$< g(\mathcal{P})(\psi), \phi >=< \widehat{g(\mathcal{P})(\psi)}, \hat{\phi} >=$$
$$< g(p)(\hat{\psi}), \hat{\phi} >= g(p) < \hat{\psi}, \hat{\phi} >= g(p) < \psi, \phi > .$$

De forma análoga, temos

$$< \psi, g(\mathcal{P})(\phi) >= \overline{g(p)} \, < \psi, \phi >= g(p) \, < \psi, \phi > .$$

O fato não trivial é que se pode considerar acima funções g não analíticas. No caso de p unidimensional, por exemplo, $g(p) = I_{(a,b)}(p)$, onde (a, b) é um intervalo.

Assim, $I_{(a,b)}(\mathcal{P})(\psi)(x) = \mathcal{F}^*(I_{(a,b)}(p)\, \widehat{\psi}(p))$.

Desta forma, via transformada de Fourier, podemos quantizar qualquer Hamiltoniano da forma $H(x, p) = g(p) + V(x)$, $V : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, onde g pode ser bastante geral (nem precisa ser diferenciável).

Desejamos descrever a evolução temporal da equação de Schrodinger via uma expressão integral no caso do potencial nulo. Mais exatamente, vamos mostrar que dada uma condição inicial ψ então para qualquer $t \geq 0$

$$\psi_t(x) = (e^{-i \frac{t}{\hbar} (-\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle)}\, \psi)\,(x) = (\frac{2\,\pi\, i\, \hbar\, t}{m})^{-n/2} \int e^{\frac{i\,m\,|x-y|^2}{2\,\hbar\,t}} \psi(y)\, dy.$$

Primeiro no que foi descrito acima considere $g(p) = e^{-\frac{a\,\hbar^2\,(p_1^2+...+p_n^2)}{2}}$, onde a parte real de a é maior que zero.

Neste caso, como $\mathcal{P}^2 = -\hbar^2\, \triangle$, temos

$$\widehat{g(\mathcal{P})(\psi)}\,(p) = e^{-\frac{a\,\hbar^2\,(p_1^2+...+p_n^2)}{2}}\, \widehat{\psi}\,(p).$$

Ainda, como $\mathcal{P}^2 = -\hbar^2 \, \triangle$, obtemos $e^{a\,\mathcal{P}}(\psi)$, e assim podemos aplicar $\mathcal{F}^*$ dos dois lados da expressão acima para obter

$$(e^{a\,\frac{\hbar^2}{2}\triangle}\,\psi)\,(x) = (2\,\pi a\,\hbar^2)^{-n/2}\int e^{-\,\frac{|x-y|^2}{2\,a\,\hbar^2}}\,\psi(y)\,dy.$$

Acima usamos o fato que $\mathcal{F}^*(\phi_1\,\phi_2)(x) = (2\pi\hbar)^{-n/2}\,[\mathcal{F}^*(\phi_2) * \mathcal{F}^*(\phi_1)]$ e que temos conhecimento da transformada de Fourier (e sua inversa) da densidade Gaussiana.

Assim a associação $\psi \to (e^{a\,\frac{\hbar^2}{2}\triangle}\,\psi)$ pode ser obtida via integração. Destacamos aqui o fato que $e^{a\,\frac{\hbar^2}{2}\triangle}\,\psi$ só faria sentido para ψ que fosse diferenciável. No entanto, a expressão integral que envolve o kernel acima pode ser aplicado em funções mais gerais e que estão em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)_{\mathbb{C}}$.

No caso em que Re $a = 0$ se pode fazer uma estimativa similar tomando um procedimento limite via a propriedade obtida para Re $a > 0$.

Considerando acima $a = \frac{i\,t}{m\,\hbar}$ se obtem que

$$\psi_t(x) = (e^{-\,i\,\frac{t}{\hbar}\,(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle)}\,\psi)\,(x) = (\frac{2\,\pi\,i\,\hbar\,t}{m})^{-n/2}\int e^{+\,\frac{i\,m\,|x-y|^2}{2\,\hbar\,t}}\,\psi(y)\,dy.$$

Observe que acima usamos o fato que $\sqrt{i} = (1+i)\,\frac{\sqrt{2}}{2}$.

Como $\int |\psi_t|^2 dx < \infty$ decorre da fórmula acima que para qualquer paralelepipedo $K = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times ... \times [a_n, b_n]$, a_j, b_j, $j = 1, 2, ..., n$, finitos fixados em $\mathbb{R}^n$, temos que

$$\lim_{t\to 0}\int_K |\psi_t(x)|^2 dx \, = 0.$$

Isto está de acordo com nossa intuição: a partícula quântica tem, a longo prazo, probabilidade nula de ser encontrada numa parte finita do $\mathbb{R}^n$.

Se considerarmos o kernel

$$K_t(x,y) = (\frac{2\,\pi\,i\,\hbar\,t}{m})^{-n/2}\,e^{\frac{i\,m\,|x-y|^2}{2\,\hbar\,t}},$$

$t \geq 0$, podemos definir o operador integral associado

$$\mathcal{K}_t(\psi)(x) = \int K_t(x,y)\psi(y)\,dy.$$

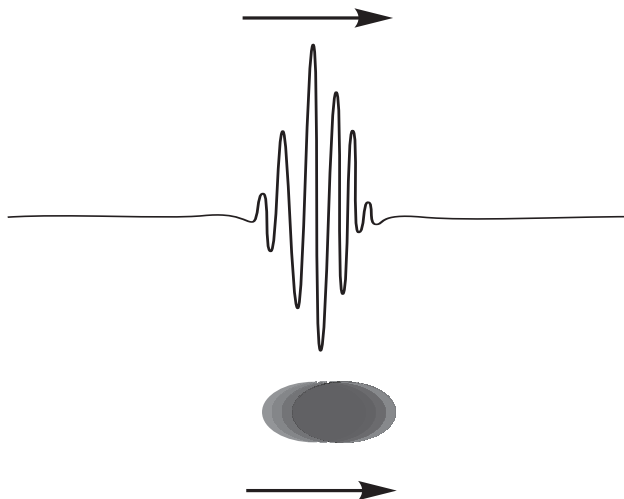



Figura 1.5: A transformada de Fourier $\hat{\psi}(p)$ de um estado ψ tal que aproximadamente vale $|\psi(x)|^2 = \cos(\alpha x)$. A região mais escura descreve a área de maior probabilidade de encontrar o momento p do estado ψ (Wikipedia)

O kernel acima, embora tome valores complexos, lembra o kernel da equação do calor.

Dado Hamiltoniano clássico $H(x,p) = \frac{p^2}{2m}$, e, sua quantização $\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle$, e uma condição inicial ψ_0, a equação de evolução satisfaz, para todo $t \geq 0$,

$$\psi_t(x) = e^{t\,\frac{1}{i\hbar}\,\mathbf{H}_0}(\psi_0) = \mathcal{K}_t(\psi_0).$$

Assim, obtivemos uma expressão via Operador Integral (usando $\mathcal{K}_t$) que permite descrever a evolução temporal do Sistema Quântico quando não existe força externa ($V = 0$, ou, constante).

Operadores integrais são sempre mais fáceis de lidar do que operadores que envolvem a derivada, ou seja, os operadores diferenciais. O kernel K_t é uma espécie de versão quântica da distribuição Gaussiana.

Suponhamos que a posição inicial da partícula seja em x_0, ou seja, $\psi_0 = \delta_{x_0}$.

A evolução então seria dada por

$$\psi_t(x) = e^{t\,\frac{1}{i\hbar}\,\mathbf{H_0}}(\psi_0)(x) = (\frac{2\,\pi\,i\,\hbar\,t}{m})^{-n/2}\,e^{-\,\frac{i\,m\,|x-x_0|^2}{2\,\hbar\,t}}\,.$$

Neste caso, para cada t fixo, $|\psi_t(x)|^2$ é constante, e, não define assim um elemento em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dp)$. Isto é esperado em função do Princípio da Incerteza como veremos em breve na seção 1.7.

Se a posição estiver muito localizada o momento fica, estatisticamente falando, muito indefinido.

Existem expressões parecidas (mas não iguais) as descritas acima para a equação do calor (ver [53]). Mais tarde na seção 2.11 vamos fazer um paralelo da Mecânica Quântica com o Movimento Browniano e difusões.

Note que formalmente, para p_0 fixo, a função $x \to e^{-\frac{i<x,p_0>}{\hbar}}$ é autofunção para o operador $\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle$. Esta função se chama de onda plana associada a p_0. O problema é que não está em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$. Como a transformada de Fourier de $x \to e^{-\frac{i<x,p_0>}{\hbar}}$, onde p_0 esta fixo, no sentido de distribuições, é a delta Dirac em p_0, podemos pensar que esta função (distribuiçao) $e^{-\frac{i<x,p_0>}{\hbar}}$ descreve um estado na variável x em que não há dispersão do momento p. A formalização da afirmação acima requer o uso da Teoria das Distribuições; isto será analisado de forma mais precisa em uma futura seção.

Note que $\mathcal{V}$ é um operador integral (no sentido degenerado de tal forma que seu kernel integral é $K(x,y) = V(x)\delta_y(dx)$). Como, infelizmente, $\mathcal{V}$ e $\mathcal{P}^2$ não comutam, não se obtem diretamente um resultado desta natureza para o exponencial de $\mathbf{H}$. Lembre que, conforme seção 0, a composição de operadores integrais é um operador integral.

Como veremos na seção 2.9, muitas vezes, também o operador $e^{t\,\frac{1}{i\hbar}\,\mathbf{H}}$ pode ser expresso via operador integral.

Suponha que $e^{t\,\frac{1}{i\hbar}\,\mathbf{H}}$, para todo t fixo, tenha kernel integral $K(t,x,y)$, $t \geq 0, x, y \in \mathbb{R}^n$. O $K_t(x,y)$ é denominado de nucleo propagador (que leva x no tempo $t=0$ a y no tempo t). Sob estas condições temos:

Definição 1.13. Dado Hamiltoniano clássico $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, e, sua quantização $\mathbf{H}$, a equação de evolução satisfaz, para todo $t \geq 0$,

$$\psi_t(x) = e^{t\,\frac{1}{i\hbar}\,\mathbf{H}}(\psi_0) = \mathcal{K}_t(\psi_0).$$

Fazendo uma analogia da ação do propagador $e^{t\,\frac{1}{i\hbar}\,\mathbf{H}}$ com a Teoria dos Processos Estocásticos (conforme [200], [262] e [201]) podemos dizer que $K_t(x,y)$ é tal que $|K_t(x,y)|^2$ faz o papel da probabilidade de passagem

da partícula que esta na posição x no tempo 0 até a posição y no tempo t (ver seção 2.11).

Vamos mostrar mais tarde, via integrais de caminhos, que, no caso do oscilador harmônico, $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\,w^2\,x^2}{2}$, o propagador que leva o ponto x (no tempo $t=0$) ao ponto y no tempo t é dado por

$$K_t(x,y) = \left(\frac{m\omega}{2\pi\, i\,\hbar \sin(\omega t)}\right)^{1/2} e^{\frac{i\,m\omega}{2\hbar\sin(\omega t)}\left[(x^2+y^2)\cos(\omega t)-2xy\right]}.$$

1.6 Exemplos

Referimos o leitor a [29] para uma série de exemplos e simulações computacionais envolvendo os tópicos aqui analisados.

1) Considere o Hamiltoniano $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\,w^2\,x^2}{2}$ do oscilador harmônico.

A equação para $\psi(x)$ na equação de Schrödinger para os autovalores da quantização $\mathbf{H}$ de tal H se torna

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{m\,w^2\,x^2}{2}\,\psi(x) \,=\, \lambda\,\psi(x).$$

Estamos considerando aqui o operador $\mathbf{H} = -\frac{\hbar}{2m}\,\frac{d^2}{dx^2} + \mathcal{V}$ definido no espaço de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx)$, que é o fecho do conjunto $D(\mathbf{H}) = \{\psi : (-\infty,\infty) \to \mathbb{C}$ de classe $C^2\ \} \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx)$.

Via separação de variáveis obtemos que a solução da equação de autovalor determina $\lambda_n = (n+\frac{1}{2})\,\hbar\,w$, $n \in \mathbb{N}$, e ainda que (ver exemplo 4 seção 3.6 em [53]) a autofunção correspondente é

$$\varphi_n(x) = (\frac{m\,w}{\pi\,\hbar})^{\frac{1}{4}}\, H_n(\sqrt{\frac{m\,w}{2\,\hbar}}\,x)\,e^{-\frac{m\,w\,x^2}{2\,\hbar}},$$

onde H_n é o n-ésimo polinômio de Hermite.

O ground state ψ_0, estado de energia mínima $E_0 = \frac{1}{2}\,\hbar\,w$, é descrito por

$$\psi_0(x) = (\frac{m\,w}{\pi\,\hbar})^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\,w\,x^2}{2\,\hbar}}.$$

Assim, $|\psi_0|^2$ vai determinar uma densidade Gaussiana com variância $a = \sqrt{\frac{h}{2\,m\,w}}$.

Esta coleção de φ_n, $n \in \mathbb{N}$, determina um conjunto ortonormal completo para o operador

$$\mathbf{H} = \frac{\mathcal{P}}{2\,m} + \frac{1}{2} m\, w^2\, \mathcal{X}^2.$$

Note que para o caso do Hamiltoniano clássico $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\,w^2\,x^2}{2}$ todos os valores reais nao negativos podem ser atingidos como possíveis niveis de energia. No caso quântico somente os valores da forma $\lambda_n = (n+\frac{1}{2})\,w\,\hbar$, $n \in \mathbb{N}$, podem ser atingidos como possíveis valores de energia.

Note também que para qualquer n e para qualquer intervalo (a,b), temos que

$$\int_a^b |\varphi_n(x)|^2\,dx > 0.$$

Assim, existe probabilidade positiva de encontrar a partícula no estado φ_n em qualquer parte da reta real. A projeção em x de cada nível de energia de tal H é sempre um intervalo limitado. Desta forma o comportamento da partícula quântica no nível de energia λ_n é bastante distinto da sua análoga clássica. Este fenômeno é denominado de tunelamento.

Nas figuras 1.9, 1.10 e 1.11 mostramos do lado esquerdo a autofunção e do lado direito a autofunção ao quadrado, no caso correspondente a $n = 0$, $n = 1$, e $n = 2$. Ou seja, o gráfico das primeiras três autofunções do oscilador harmônico quântico.

Note que no oscilador harmônico o ground state é da forma $\phi_0 = A\,e^{\frac{-x^2}{\alpha}}$, onde $\alpha = \frac{2\,\hbar}{m\,w}$. Assim, quando a massa tende a infinito temos que a variância (que é da ordem de $\sqrt{\alpha}$) vai a zero e assim a distribuição probabilística da partícula (via função de onda) converge a delta Dirac centrada em 0. Esta é uma descrição bem sucedida da passagem do mundo quântico ao clássico.

Tomando w tal que $w^2 = \frac{1}{m}$ no Hamiltoniano $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\,w^2\,x^2}{2}$ obtemos o Hamiltoniano $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{x^2}{2}$.

Neste caso a massa não interfere no potencial $V(x) = \frac{x^2}{2}$. Isto nos parece mais razoável do ponto de vista do fenômeno físico.

Neste caso os autovalores são $\lambda_n = (n+\frac{1}{2})\,\hbar\,\frac{1}{\sqrt{m}}$. Note que $\lambda_{n+1} - \lambda_n = \hbar\,\frac{1}{\sqrt{m}}$.

Observamos que a medida que a massa m cresce o espaçamento entre os níveis de energia diminui. Neste sentido o limite semiclássico seria considerar $m \to \infty$ e desta forma o espaçamento tenderia a zero.

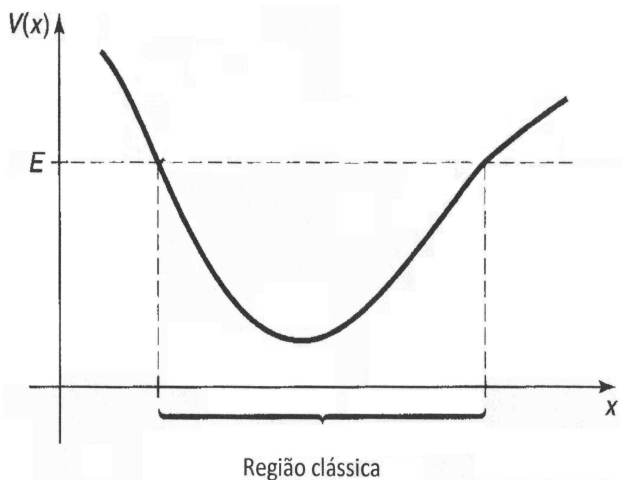



Figura 1.6: Na Mecânica Clássica num certo nível de energia fixo E os valores possíveis de x estão somente na região clássica exibida pela figura. Na Mecânica Quântica existe probabilidade positiva de encontrar a partícula fora da região clássica (tunelamento)

O que queremos dizer com isto é o seguinte: fixe (x_0, p_0) e para cada massa m considere o correspondente Hamiltoniano $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{x^2}{2}$; considere ainda $n \in \mathbb{N}$ e o nível de energia clássico que passa por (x_0, p_0) com energia $E_0 = H(x_0, p_0) = \lambda_n = (n + \frac{1}{2})\, \hbar\, \frac{1}{\sqrt{m}}$. O espaçamento entre estes níveis de energia tende a zero com $m \to \infty$ e assim no cenário clássico se tem a ilusão de que os níveis de energia variam num contínuo.

O tempo de ocupação assintótica da partícula clássica num nível de energia E (próxima a um ponto de mínimo quadrático do potencial V, que supomos aqui ser o ponto 0 na reta real) é definido da seguinte forma (para mais detalhes referimos a seção 3.7 em [228]): vamos supor que (x,p) está em $\mathbb{R}^2$ para simplicar a descrição. Fixada uma condição inicial (x_0, p_0), considere $(x(t), p(t))$ a correspondente trajetória do campo de vetores Hamiltoniano definido pela equação de Hamilton para $H(x,p)$. Pelo teorema de conservação de energia existe E tal que $H(x(t), p(t)) = E$ para todo t.

Fixada uma trajetória periódica $(x(t), p(t))$ de período $T_E > 0$, seja

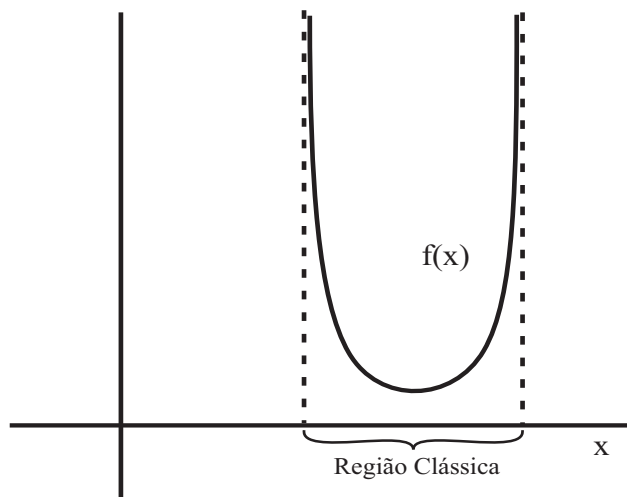



Figura 1.7: densidade $f(x)$ do tempo de ocupação assintótico.

γ a órbita do campo Hamiltoniano, ou seja, γ é o conjunto dos pontos percorridos pela trajetória $(x(t), p(t))$.

Fixado o nível de energia E existe uma probabilidade ρ_E con suporte em $\{(x,p)|, | H(x,p) = E\}$ tal que é invariante pelo fluxo Hamiltoniano ϕ_t, $t \in \mathbb{R}$, restrito a $\{(x,p) \,|\, H(x,p) = E\}$ (ver seção 5 [229]). Isto é, dado um conjunto $A \subset \{(x,p) \,|\, H(x,p) = E\}$ vale que $\rho_E\,(\phi_t(A)) = \rho_E(A)$ para todo t.

Vamos projetar esta medida ρ_E na reta $\{(x,0) \,|\, x \in \mathbb{R}\}$ e obter uma probabilidade natural μ_E. Vamos descrever abaixo como se obter isto.

Fixado o nível de energia E existe um intervalo $[a_E, b_E]$ que é a projeção de $\gamma = \gamma_E$ na coordenada x, ou seja,

$$[a_E, b_E] = \{x(t) \,|\, t \in \mathbb{R},\, (x(t), p(t)) \in \gamma_E\}.$$

Fixado um intervalo $[a, b]$ contido em a_E, b_E e um tempo T, considere

$$G[T, a, b] \;=\; \{t \in \mathbb{R}\,, T \geq\; t\; \geq 0, \;\; \text{tais que } x(t) \in [a,b]\,(x(t), p(t)) \in \gamma_E\}.$$

O conjunto $G[T, a, b]$ é uma união de intervalos disjuntos cuja soma total de comprimentos será denotada por $l(T, a, b)$.

Definição 1.14. Se γ_E é uma órbita periódica de período $T_E > 0$ do campo Hamiltoniano H, obtida a partir de uma condição inicial (x_0, p_0), dizemos que

$$\hat{o}([a,b]) = \lim_{T\to\infty} \frac{l(T,a,b)}{T} \leq 1$$

é o tempo de ocupação assintótico do intervalo $[a, b]$.

Assim, o tempo de ocupação $\hat{o}([a, b])$ do intervalo $[a, b]$ é sempre um número real entre 0 e 1. Ele fornece o tempo médio que a projeção da trajetória $(x(t), p(t))$ permanece em $[a, b]$. Em princípio este valor deveria depender de (x_0, p_0), mas no caso do presente exemplo, tal não acontece (ver seção 3.7 em [228]).

Pode-se mostrar que $\hat{o}$ define uma probabilidade μ_E na variável x sobre o intervalo $[a_E, b_E]$. Usando coordenadas ação-ângulo (ver [228]) se pode obter uma densidade $f = f_E$, tal que, para todo intervalo $[a, b] \subset [a_E, b_E]$ vale

$$\mu_E([a,b]) = \hat{o}([a,b]) = \int_a^b f(x)dx.$$

Pode-se mostrar que a projeção da medida ρ_E sobre a reta $\{(x, 0) \,|\, x \in \mathbb{R}\}$ é a probabilidade μ_E (mais detalhes na seção 3.7 em [228]).

Observe que é natural que o tempo médio de estadia nas regiões extremas da região clássica (perto de onde a velocidade é zero) é mais alto.

Denominamos $f : [a_E, b_E] \to \mathbb{R}$ a *densidade do tempo de ocupação assintótica* do nível de energia E.

Fica assim definida no conjunto $[a_E, b_E]$ uma medida $\mu = \mu_E$ que é a projeção na variável x de uma medida invariante $\rho = \rho_E$ pelo fluxo Hamiltoniano no nível de energia. No caso de um Hamiltoniano $H(x, p)$ qualquer existem condições razoavelmente gerais para a existencia de medidas ρ_E invariantes pelo fluxo Hamiltoniano em cada nível de energia (ver Proposição 5.5 cap. 5 em [229])

Vamos agora retornar ao cenário quântico.

Denotamos por α_0 a constante $(\frac{\hbar}{m\,w})^{1/2}$ e esta pode ser encarada como uma unidade de medição normalizada. Vamos fazer uma mudança de escala e denotar $s = x/\alpha_0$.

No caso do nível de energia $E_n = \lambda_n = (n + 1/2)\, w\, \hbar$ a densidade do tempo de ocupação asintótica em s está confinada a região clássica $[-(2n+1)^{1/2}\,, (2n+1)^{1/2}\,]$.

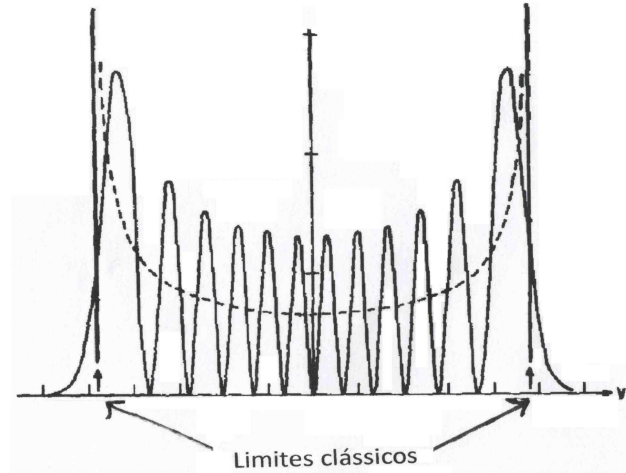



Figura 1.8: A linha pontilhada descreve o tempo de ocupação assintótica da partícula no nível de energia E segundo a Mecânica Clássica. A linha cheia descreve a densidade $|\psi|^2$ associada a um estado ψ que se encontra neste mesmo nível de energia $E = E_{20} = (20+1/2)\, w\, \hbar$. Note que existe uma probabilidade positiva de se encontrar a partícula fora da região clássica. Isto descreve o fenômeno do tunelamento. Ver tambem figuras 1, 2 e 3 em [117].

De fato, se

$$\frac{p^2}{2m} + \frac{m\, w^2\, x^2}{2} = (n + 1/2)\, w\, \hbar,$$

os extremos ocorrem para $p = 0$. Assim, segue a afirmação acima.

Ainda, se pode calcular a densidade classica (ver [228]) associada ao nível

$$f(x) = f_n(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{2\, n + 1 - x^2}}.$$

Referimos o leitor ao exercício 1 da seção 3.7 [228] para a idéía da prova desta afirmação.

Associado ao autovalor λ_n existe uma autofunção $\varphi_n(x)$ para o operador Hamiltoniano (que foi descrita acima).

A partir do que discutimos acima fica determinado uma medida μ_{E_n} (clássica) com densidade f_n com suporte na região clássica $[-(2n+1)^{1/2}, (2n+1)^{1/2}]$. Esta medida não é igual a medida (quântica) com densidade $|\varphi_n(x)|^2$ (que corresponde a probabilidade da posição da partícula

quântica que tem nível de energia E_n). As duas ficam "parecidas"se λ_n (ou seja a energia) fica grande. Isto é descrito pela figura 1.8.

De forma semelhante se pode projetar a probabildiade ρ_{E_n} agora na variável p (e não x) obtendo uma densidade $g_n(p)$ e uma medida ν_{E_n} com esta densidade (e que tem suporte na projeção do nível de energia E_n na reta $\{(0,p), p \in \mathbb{R}\}$). Resultados semelhante são verdadeiros para a transformada de Fourier $\hat{\varphi_n}(p)$ de $\varphi_n(x)$, se λ_n (ou seja a energia) fica grande.

Agora voltamos ao estudo da projeção na variável x. Seria natural, para um certa massa m fixada, comparar a probabilidade da função de onda estacionária associada a um nível de energia $E_n = \lambda_n = (n+\frac{1}{2})\, w\, \hbar$ do oscilador harmônico quântico e a correspondente densidade do tempo de ocupação assintótico (clássico) neste nível de energia. A figura 1.8 ilustra tal comparação. A curva pontilhada descreve a densidade do tempo de ocupação e a curva cheia o gráfico da densidade do estado no mesmo nível de energia $E_{20} = (20 + 1/2)\, w\, \hbar$.

Fixado o nível de energia E, existe uma probabilidade positiva de se encontrar a partícula fora da região clássica. Isto descreve o fenômeno do assim chamado *tunelamento*.

Referimos o leitor a seção 4.2.2 do capitulo 4 de

http://www.instructioneducation.info/inhaltquant.html

para uma descrição com muitas ilustrações e figuras do que consideramos acima.

Um comentário final a respeito do descrito acima em termos de limite semi-classico: quando $\hbar \to 0$ (caso A) e quando consideramos o limite - quando $n \to \infty$ - de estados associados a energias λ_n (caso B).

Dado um Hamltoniano clássico $H(x,p)$ é natural pensar que uma medida obtida por alguma forma de limite semiclássico do Hamiltoniano quantizado deveria capturar propriedades da equação de Hamilton do Hamiltoniano H. Seria natural então esperar invariancia pela ação do fluxo. As medidas obtidas através de função de onda estacionárias (estado) - e que estão definidas na variável x - estão associadas a um nível de energia único. Assim, se esperaria obter no limite semiclássico - de alguma forma - a projeção na variável x de uma medida invariante num nível de energia fixo.

A) Primeiro vamos supor que o sistema Hamiltoniano classico $H(x,p)$ seja integravel. Para simplificar vamos pensar que x é unidimensional e

que os níveis de energia sejam curvas no espaço de fase (x, p). Por exemplo como acima quando consideramos o caso do oscilador harmônico. Cabe observar **neste caso** que é da natureza da Mecânica Quântica que para um certo Hamiltoniano fixado as medidas naturais (estacionarias) aparecem associadas a niveis de energia. Ou seja, na variavel x mas não correspondem exatamente a uma probabilidade no espaco total $x \in \mathbb{R}^n$ (não levando em conta tunelamento). Este ponto importante deve ser levado em conta na hora em que a gente se pergunta: o que pode esperar no limite semiclassico? Não se esperaria obter uma probabilidade no espaco total mas algo que tem que ver apenas com a variavel x associado a "um"nível de energia. Mais especificamente, o ground state, por exemplo, deveria convergir no limite a "uma certa medida de probabilidade"associada ao nivel de energia clássico mais baixo (ver [173] e [174]). As outras autofunções no setting quântico (com energia acima desta) deveriam determinar "cada uma delas"(no limite $\hbar \to 0$) uma medida μ_E na variavel x que corresponderia a projeção na variável x de uma medida invariante ρ_E para o fluxo Hamiltoniano clássico "num certo nível de energia fixo E"(elas ficam com suporte mais e mais próximos um dos outros quando $\hbar \to 0$ pois o espaçamento entre niveis deveria ir a zero). Ou seja, cada medida limite deveria respeitar os limite clássicos, como descrito acima, e ainda ser igual a projeção da medida invariante pelo fluxo Hamiltoniano (a medida de Liouville com suporte no nível de energia conforme [15] e [229]) na variável x (a medida descrita acima pelo tempo de ocupação assintotico). Os resultados na Teoria de Aubry-Mather (ver [108] [147], [12], [234], [144]), em termos de limite semiclássico, estão alinhados com tal ponto de vista ao fixar uma posição homológica.

B) Outra situação bem distinta é quando o sistema Hamiltoniano clássico descrito pela equação de Hamilton para o Hamiltoniano $H(x, p)$ não é integrável. Pelo resultado da conservação de energia total se sabe que as trajetórias $(x(t), y(t))$ estão dentro de superficies do tipo $\{(x, p) \,|\, H(x, p) = E\}$, onde E é uma constante. Como exemplo considere uma variedade Riemanniana compacta M e o seu operador Laplaciano associado. Considere o Hamiltoniano $H(x, p) = \frac{|p|^2}{2}$ (do fibrado cotangente $T^*(M)$ em $\mathbb{R}$) e seu quantizado $\mathbf{H} = \frac{\Delta}{2}$. Neste caso o fluxo Hamiltoniano deixa invariante o fibrado unitário $\{(x, p) | \, |p| = 1\}$ (ver [58] ou Appendix 21 em [16]). Suponha agora que a variedade Riemanniana tenha curvatura constante negativa (ver [58] para definições). Existe

neste caso uma medida natural μ denonominada de medida de Liouville (com suporte em $\{(x,p)|\,|p|=1\}$) que é invariante para o fluxo Hamitoniano restrito ao nível de energia E (ver [16] ou [229]). Neste caso o fluxo Hamiltoniano (restrito ao fibrado unitário) é um fluxo de Anosov e a medida de Liouville é ergódica (ver [15] e Chapter 3 e Appendix 21-22-23-24-25 em [16]). Para um $\hbar$ fixado denote $\mathbf{H}=\frac{\mathbf{\Delta}}{\mathbf{2}}=\sum_{\mathbf{j=1}}^{\infty}\lambda_{\mathbf{j}}\,|\psi_{\mathbf{j}}><\psi_{\mathbf{j}}|$, ou seja, $\mathbf{H}$ possui um conjunto ortonomal completo $\psi_j, j\in\mathbb{N}$. A teoria da Quantum Ergodicity (ver [331] e [13]) tenta analisar no caso não integrável (como acabamos de descrever) o que acontece com a medida de probabilidade $|\psi_j|^2 : M\to\mathbb{R}$, (no espaço $x\in M$) quando $j\to\infty$. Existe uma similaridade deste procedimento com o descrito anteriormente nesta seção para o Hamiltoniano integravel descrito pelo oscilador harmonico, mas agora a situação é **bem mais complexa**.

O teorema da ergodicidade quântica de Shnirelman, de Verdiere e Zelditch (ver [91] e [348]) afirma que uma variedade Riemanniana compacta - cujo fibrado unitário é ergódico para o fluxo geodésico - é tal que a densidade de probabilidade $|\psi_j|^2 : M\to\mathbb{R}$ converge fracamente, quando $j\to\infty$, para a projeção da medida de Liouville **projetada** em M. Isto ocorre quando a sequencia de j é escolhida num subconjunto dos números naturais $K\subset\mathbb{N}$ de densidade 1 sobre o conjunto dos naturais.

2) O segundo exemplo considera uma partícula que pode se mover livremente no intervalo $[0,a]$, $a>0$.

Sendo assim, como não existem forças externas podemos supor que V é constante igual a zero.

A equação para $\psi(x)$ que é autofunção de $\mathbf{H}$ se torna

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)=\,\lambda\,\psi(x).$$

Como a partícula quântica deve estar confinada ao intervalo $[0,a]$ é "natural"(pelo menos para quem não está familiarizado com o cenário quântico) considerar apenas ψ tais que $\psi(0)=0=\psi(a)$. Na verdade estamos pensando que no sistema clássico associado a partícula colide com os extremos e é jogada de volta para dentro do intervalo.

É importante destacar que estamos considerando aqui o operador $\frac{d^2}{dx^2}$ definido no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ que é o fecho em $\mathcal{L}^2([0,a])(dx)$ de $\{\psi:(0,a)\to\mathbb{C}$ de classe C^2 tal que $\psi(0)=0=\psi(a)\}$.

A função ψ constante igual a zero não nos interessa.

Uma vez encontrada a ψ então, a solução ao longo do tempo seria $\psi_t(x) = e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda}\,\psi(x)$.

A solução geral da equação diferencial de segunda ordem acima é

$$A\cosh(\sqrt{2\,m|\lambda|}\frac{x}{\hbar}) + B\sinh(\sqrt{2\,m|\lambda|}\frac{x}{\hbar}),\ \text{ se } \lambda < 0$$

$$A + Bx,\ \text{ se } \lambda = 0,$$

e

$$A\cos(\sqrt{2\,m\lambda}\frac{x}{\hbar}) + B\sin(\sqrt{2\,m\lambda}\frac{x}{\hbar}),\ \text{ se } \lambda > 0,$$

onde A, B são constantes reais.

A condição $\psi(0) = 0$ força A a ser nulo. Se $\lambda \leq 0$, então B tem que se anular, porque $f(a) = 0$.

Se $\lambda > 0$, obtemos $\psi = B\,\sin(\sqrt{2\,m\lambda}\frac{x}{\hbar})$. As condições de fronteira fazem com que λ deve ser necessariamente da forma $\sqrt{2\,m\lambda}\frac{a}{\hbar} = n\,\pi$, para algum n natural.

Desta maneira obtemos que os autovalores são da forma

$$\lambda_n = \frac{n^2\,\hbar^2\,\pi^2}{2\,m\,a^2},\ n \in \mathbb{N}$$

As autofunções φ_n, $n \in \mathbb{N}$, correspondentes, já normalizadas, são

$$\varphi_n(x) = \frac{\sin(\sqrt{2\,m\lambda_n}\frac{x}{\hbar})}{|\ \sin(\sqrt{2\,m\lambda_n}\frac{1}{\hbar}(.))\ |_2} = \frac{\sin(\sqrt{2\,m\lambda_n}\frac{x}{\hbar})}{\sqrt{\frac{\pi\,n\,\hbar}{2\,\sqrt{2\,m\,\lambda_n}}}} = \frac{\sin(\sqrt{2\,m\lambda_n}\frac{x}{\hbar})}{\sqrt{a/2}}.$$

Note que esta coleção define um conjunto ortonormal completo no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ em consideração.

Os λ_n correspondem aos possíveis níveis de energia do sistema

Desta forma se o estado se encontra no nível de energia λ_3, a probabilidade de encontrá-la na posição x entre $[c, d] \subset [0, a]$ é dada por

$$\int_c^d |\varphi_3(x)|^2\,dx = \int_c^d \frac{|\sin(\sqrt{2\,m\lambda_n}\frac{x}{\hbar})|^2}{\sqrt{a/2}}\,dx.$$

Na figura 1.12 mostramos o gráfico das três primeiras autofunções ao quadrado no caso de presente exemplo.

O valor esperado de $\mathcal{X}$ será

$$E(\mathcal{X}) = \int_0^a x|\varphi_3(x)|^2\, dx.$$

A solução geral da equação de Schrödinger será

$$\psi_t(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda_n} \varphi_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda_n} \sin(\sqrt{2\, m\lambda_n}\frac{x}{\hbar})\,\frac{1}{\sqrt{a/2}},$$

onde α_n, $n \in \mathbb{N}$, são números complexos.

Por exemplo,

$$\psi_t(x) = (7+3i)\, e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda_2} \sin(\sqrt{2\, m\lambda_2}\frac{x}{\hbar}) + \,(2-3i) e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda_5} \sin(\sqrt{2\, m\lambda_5}\frac{x}{\hbar})$$

é uma solução. Este estado vai permitir observar a partícula em níveis de energia λ_2 e λ_5.

No caso geral, seja $V : [0,a] \to \mathbb{R}$ contínuo e considere o espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2([0,a], dx)$ em que assumimos que $\psi(0) = 0 = \psi(a)$.

O estudo dos autovalores e autofunções associados a equação

$$\mathbf{H}(\varphi) = -\frac{\hbar}{2\, m}\frac{d^2\varphi(x)}{d^2x} + V(x)\varphi(x) = \lambda\varphi(x)$$

faz parte do assim chamado problema de Sturm-Liouville. Referimos o leitor a [176] ou [219] para o estudo do espectro do operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$ neste caso.

3) O terceiro exemplo considera uma partícula que pode se mover livremente no círculo $\mathbb{S}^1$, ou seja, em $[0, 2\pi)$, onde identificamos 0 e 2π.

Este problema é conceitualmente distinto do anterior. Aqui a partícula (que digamos se encontra um pouco a esquerda de 2π) poderia "passar" via o ponto $2\,\pi$, de forma contínua para os pontos um pouco maiores que 0 (estamos no círculo). O caso anterior descreve uma partícula que ao chegar ao extremo direito a, "colide" e volta de forma contínua para dentro do intervalo $[0, a]$, e, em pontos próximos a a.

Não vamos assumir que $\psi(0) = 0 = \psi(2\pi)$ mas apenas que $\psi(0) = \psi(2\pi)$.

Sendo assim, como não existem forças externas podemos supor que V é constante igual a zero.

A equação para $\psi(x)$ a autofunção se torna

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \lambda\, \psi(x).$$

Como a partícula quântica deve estar confinada em $\mathbb{S}^1$ é "natural" considerar apenas os ψ tais que $\psi(0) = \psi(2\pi)$.

Estamos considerando aqui o operador $\frac{d^2}{dx^2}$ definido no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ que é o fecho em $\mathcal{L}^2([0,2\pi])(dx)$ de $\{\psi : [0,2\pi] \to \mathbb{C}$ de classe C^2 tal que $\psi(0) = \psi(2\,\pi)\}$.

Da mesma maneira como procedemos no exemplo anterior obtemos que os autovalores, neste caso, são da forma

$$\lambda_n = \frac{n^2\,\hbar^2}{m\,2},\ n \in \mathbb{N}.$$

As autofunções φ_n, ϕ_n, $n \in \mathbb{N}$, correspondentes, já normalizadas, são

$$\varphi_n(x) = \frac{\sin(\sqrt{2\,m\lambda_n}\frac{x}{\hbar})}{|\,\sin(\sqrt{2\,m\lambda_n}\frac{1}{\hbar}\,(.))\,|_2},$$

e

$$\phi_n(x) = \frac{\cos(\sqrt{2\,m\lambda_n}\frac{x}{\hbar})}{|\,\cos(\sqrt{2\,m\lambda_n}\frac{1}{\hbar}\,(.))\,|_2}.$$

Note que esta coleção define um conjunto ortonormal completo no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ em consideração.

Desta forma a solução geral da equação de Schrödinger será

$$\psi_t(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\alpha_n e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda_n}\varphi_n(x) + \sum_{n=0}^{\infty}\beta_n e^{-i\frac{t}{\hbar}\lambda_n}\phi_n(x),$$

onde α_n, β_n, $n \in \mathbb{N}$, são números complexos.

Conforme mencionamos (de acordo com a pagina 206 e Theorem 2.105 de [105] por exemplo) antes dado um potencial V em S^1, ou seja, $V : [0,1] \to \mathbb{R}$ periódico (isto é: $V(0) = V(1)$), e de classe C^∞, então existe um conjunto ortonormal completo de autofunções periódicas diferenciáveis $\varphi_n : [0,1] \to \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{N}$ para $\mathbf{H}$. As φ_n são ortogonais em relação ao produto interno em $\mathcal{L}^2(dx)$, ou seja $\int \varphi_n\,\varphi_k dx = 0$, quando $n \neq k$. Uma prova deste resultado aparece em [340].

Não vamos assumir no espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2(dx)$ que $\psi(0) = 0 = \psi(1)$ mas apenas que $\psi(0) = \psi(1)$.

O caso descrito acima é apenas um caso particular deste caso em que V é periódica mas qualquer.

Embora V seja um função limitada e os autovalores de $\mathbf{H}$ atingem valores ilimitados.

Note ainda que φ_n satisfaz a equação diferencial ordinária de segunda ordem

$$-\frac{\hbar}{2\,m}\frac{d^2\varphi_n(x)}{d^2x} + V(x)\varphi_n(x) = \lambda_n\varphi_n(x),$$

onde V é de classe C^∞. Assim, qualquer autofunção é de classe C^∞.

Observe que só existe uma autofunção φ_n que é estritamente positiva. De fato se existissem duas autofunções positivas φ_n e φ_k, então $\int \varphi_n\,\varphi_k\,d\,x \neq 0$, o que seria contradição.

Caberia ainda a possibilidade de haver mais de uma autofunção associado ao menor autovalor. Vamos elucidar tal questão.

Seja λ_0 o menor autovalor. Vamor mostrar na seção 2.3 que qualquer autofunção ground state φ_0 minimiza

$$\lambda_0 = \int \quad \frac{\hbar^2}{2\,m}\,|\frac{d\,\psi}{dx}\,(x)\,|^2\; + V(x)|\psi(x)|^2\;\; dx, \tag{1.5}$$

entre os diversos ψ de norma 1.

Ainda, se um certo ψ mimiza tal expressão então será uma autofunção (e assim de classe C^∞)

O espaço natural para tratar tal problema é o das funções ψ de quadrado integrável tais que $\int |\frac{d\,\psi}{dx} d\,(x)\,|^2\,dx < \infty$. Este espaço é conhecido como o espaço de Sobolev $H_{0,1}$ (mais detalhes em [333]).

Observe que qualquer autofunção φ_n não pode em um dado ponto y satisfazer simultaneamente $\varphi_n(y) = 0$ e $\varphi_n'(y) = 0$. Isto iria contrariar o teorema de existencia e unicidade pois a função constante igual a zero satisfaz a equação diferencial de segunda ordem e as duas condições.

Se houver alguma autofunção φ_0 que assume valores negativos e positivos então $|\varphi_0|$ também sera minimizante da integral acima (1.5) e assim a autofunção $|\varphi_0|$ atinge o valor 0 em algum ponto y. Como $|\varphi_0|$ é diferenciável (como afirmamos antes qualquer autofunção é de classe C^∞) então $|\varphi_0|'(y) = 0$. Isto como vimos no desenvolvimento acima isto não é possível.

Assim a autofunção que é estritamente positiva corresponde ao ground state.

Suponha que existam duas autofunções reais distintas f_1 e f_2 associadas ao menor autovalor λ_0. Como $\int (f_1^2(x) - f_2^2(x))\, dx = 0$, então existe ponto x_0 tal que $f_1^2(x_0) - f_2^2(x_0) = 0$. Disto segue que $f = f_1 - f_2$ é autofunção associado ao autovalor λ_0 e além disso $f(x_0) = 0$. Como isto não é possível concluímos que a multiplicidade do menor autovalor é 1.

O estudo do limite semiclássico do ground state em superfícies aparece por exemplo em [173].

A equação

$$\mathbf{H}(\varphi) = -\frac{\hbar}{2\,m} \frac{d^2\varphi(x)}{d^2x} + V(x)\varphi(x) = \lambda\varphi(x).$$

e sua relação com a formula de Feymnan-Kac aparece em [257] [310] e no capítulo 15 em em [201].

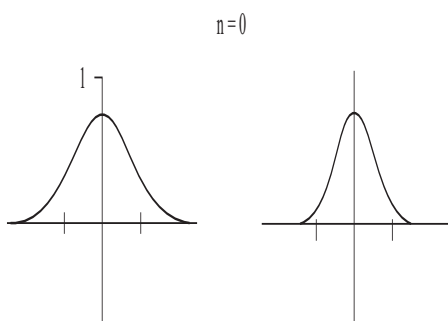



Figura 1.9: Seja ψ_0 o ground state do oscilador harmônico. A esquerda seu gráfico e a direita o gráfico de $|\psi_0|^2$

4) Seja $A(x) = (a_{ik}(x)),\ i,k = 1,2...,n,\ x = (x_1, x_2, .., x_n)$, matriz simétrica real positiva definida indexada por $x \in B \subset \mathbb{R}^n$, que determina desta forma uma métrica Riemanniana no aberto B do plano $\mathbb{R}^n$, isto é, $|v|_x =< v, A(x)v >$, onde $v \in \mathbb{R}^n$ é um vetor tangente com ponto base $x \in B$, e, $<,>$ é o produto interno canônico (ver seção 2 em [228]).

Isot é $< u, v >_x = u\,A(x)v \in \mathbb{R}$, $u, v \in \mathbb{R}^n$, onde u é visto como vetor linha e v como vetor coluna.

As soluções da equação de Euler Lagrange para o Lagrangeano $L(x,v) = \frac{m}{2}\,|v|_x^2$ são geodésicas da métrica Riemianna. Neste caso o o potencial V é nulo.

No caso de um Lagrangeano L geral a equação de Euler-Lagrange é dado pelo sistema de e.d.o. de segunda ordem

$$\partial_{x_i} L\,(x(t), x'(t))\; - \frac{d}{dt}\partial_{v_i} L(x(t), x'(t)) = 0,$$

$i = 1, 2..., n.$

O correspondente operador Laplaciano é

$$\Delta F(x_1, x_2, .., x_n) = \frac{1}{\sqrt{\det\, A(x)}} \sum_{k,i=1}^{n} \frac{\partial}{\partial x_i}\,(\,\sqrt{\det\, A(x)}\, a_{ki}(x) \frac{\partial\, F(x)}{\partial x_k}\,).$$

Referencias gerais sobre tópicos em Geometria Riemanniana podem ser encontrados em [58]. O texto [208] cobre na seção II. 3 alguns aspectos gerais da quantização em variedades Riemannianas.

Se pode considerar mais geralmente uma métrica Riemanniana numa variedade diferenciável M que define em cada ponto $x \in M$ para cada vetor tangente v a M no ponto x um valor $|v|^2$ (ver [58]). A soluções da equação de Euler-Lagrange são as geodésicas da variedade Riemanniana (ver seção 2 em [228]). Existe uma maneira geral de definir o operador Laplaciano Δ a partir da métrica Riemanniana (ver [333]).

Dada uma função $V : M \to \mathbb{R}$ diferenciável se pode considerar o operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$

$$f \to \mathbf{H}(f) = \, -\frac{\hbar^2}{2\,m} \Delta f + V\, f.$$

Assim, para $\psi : \mathbb{R} \times M \to \mathbb{C}$ obtemos a correspondente equação de Schrodinger

$$\frac{d\psi}{dt} = \psi'(t) = \frac{1}{i\hbar} \mathbf{H}(\psi(t)).$$

No caso da métrica hiperbólica (ver seção 5 chapter 8 in [333], section 2 em [228] ou [58]) temos que $B = \{(x, y) |\, y \geq 0\}$ é o semi-plano superior contido em $\mathbb{R}^2$, e, para $(x, y) \in \mathbb{R}^2$

$$-\,\Delta F(x, y) = \, -\,y^2\,(\frac{\partial^2\, F(x, y)}{\partial^2 x} \, + \frac{\partial^2\, F(x, y)}{\partial^2 y}\,)$$

descreve o operador de Schrodinger quando não existe energia potencial (ou seja, $V = 0$).

No caso de se considerar apenas a energia cinética estaremos buscado autovalores λ do operador de Schrodinger (que são expressos usualmente como $\lambda = -s\,(s-1)$, onde s é da forma $s = 1/2\,+ i\rho$, $\rho \in \mathbb{R}$).

Sendo assim uma autofunção deve satisfazer

$$-y^2\,(\frac{\partial^2\,\psi(x,y)}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2\,\psi(x,y)}{\partial^2 y}\,) = -s\,(s-1)\,\psi(x,y).$$

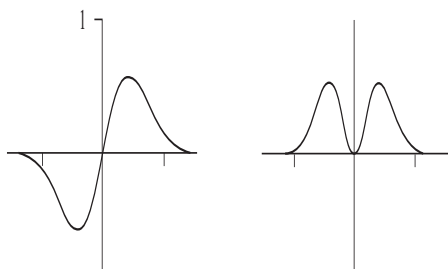



Figura 1.10: Seja ψ_1 a segunda autofunção do oscilador harmônico. A esquerda seu gráfico e a direita o gráfico de $|\psi_1|^2$

O s-Helgason kernel é definido como

$$(\frac{y}{(x-t)^2 + y^2})^s,$$

onde t é um parâmetro real.

Fixada qualquer distribuição f na reta real (ver seção 1.14, mas poderia ser também um função integrável $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$), então

$$\int f(t)\,(\frac{y}{(x-t)^2 + y^2})^s\,dt = \psi(x,y)$$

determina uma autofunção de

$$y^2\,(\frac{\partial^2}{\partial^2 x} + \frac{\partial^2}{\partial^2 y}\,),$$

associada ao autovalor real $s\,(s-1)$ [165], [45] ou [232].

No caso de se considerar um superfície compacta obtida como quociente de B pela ação de um grupo hiperbólico existirão restrições sobre a distribuição f para que a autofunção seja automorfa [45] [232].

Referimos o leitor para [202] para resultados gerais sobre o espectro do operador de Schrodinger em variedades Riemannianas.

5) No caso do sistema estar sob a ação de uma campo eletromagnético externo devemos considerar uma função $A(x)$ (o termo correspondente a parte elétrica) e $V(x)$ (o termo correspondente a parte magnética).

O correspondente Hamiltoniano quantizado será

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2\,m}\,(\frac{\hbar}{i}\,\frac{d}{dx} - \frac{e}{c}\,\mathcal{A})^2 + e\,\mathcal{V},$$

onde e é a carga da partícula.

A evolução temporal da função de onda ψ_t será descrita pela equação de Schrödinger deste potencial. Referimos o leitor para a seção 3.1 em [12] para um discussão sobre o operador Hamiltoniano associado a este problema.

O Hamiltoniano do oscilador harmonico unidimensional com termo magnético e massa $m = 1$ é

$$\frac{1}{2}[\,(-i\,\hbar\,\frac{d}{dx} + \,b\;\;x)^2 + w^2\,x^2],$$

onde $b = -\frac{e}{c}$.

Obtemos assim o operador

$$\varphi \to \mathbf{H}(\varphi) \;=\frac{1}{2}\,[\,-\hbar^2\frac{d^2}{dx^2}\varphi - b\,x\hbar i\,\frac{d}{dx}\varphi - \hbar i\,\frac{d}{dx}(b\,x\,\varphi) + (b^2x^2 + w^2x^2)\varphi\,].$$

Neste caso

$$e^{-(w^2+b\,i)\,x^2\,\frac{1}{2\,\hbar}}$$

é autofunçao associada ao autovalor $\lambda = \frac{1}{2}w\,\hbar$.

Um interessante estudo da equação

$$\mathbf{H}(\varphi) = -\frac{\hbar}{2\,m}\frac{d^2\varphi(x)}{d^2x} + a(x)\frac{d\varphi(x)}{dx} \,+\, V(x)\varphi(x) = \lambda\varphi(x).$$

e sua relação com difusões e a formula de Feymnan-Kac aparece em [333], [257] e também em (5.39) na pagina 225 do capítulo 15 em [201]. Sobre o espectro ver seção 13 capítulo 15 em [201]. O termo $a(x)\frac{d\varphi(x)}{dx}$

é denominado drift (ver Teorema 4.1 na pagina 124 de [133] e expressão (4.1) página 139 em [133]).

O estudo do limite semiclássico do ground state associado a equação acima aparece em [173].

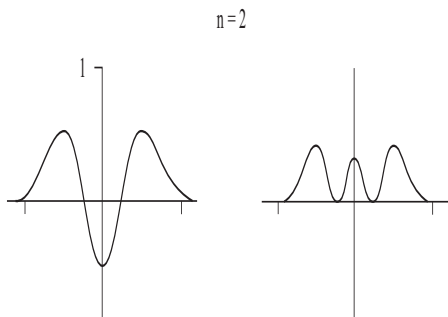



Figura 1.11: Seja ψ_2 a terceira autofunção do oscilador harmônico. A esquerda seu gráfico e a direita o gráfico de $|\psi_2|^2$

1.7 Princípio da Incerteza e o Pacote de Onda Gaussiano

Uma das questões que vamos analisar nesta seção é a eventual relação entre fazer medições simultâneas da posição e do momento de uma partícula que se encontra num determinado estado.

Definição 1.15. Suponhamos que ψ em $\mathcal{H}$ não esteja normalizada. Seja $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um observável, o valor esperado de A é dado por

$$E_\psi(A) = \frac{\langle \psi, A\psi \rangle}{\|\psi\|^2}$$

Em Estatística se está muitas vezes interessado em como estão dispersos os valores em torno da média. Por exemplo, suponha que esteja fixado $a > 0$ e consideremos a densidade Gaussiana ϕ_a de média espacial x_0, e, variância a. Desta forma, o valor esperado da posição X é

$$E(X) = \int x\phi_a(x)dx = x_0.$$

Figura 1.12: Exibimos acima o gráfico das três primeiras autofunções ao quadrado no caso do exemplo 2)

Como a norma em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})(dx)$ de ϕ_a é igual a 1, a expressão análoga à quântica descrita anteriormente seria

$$E_{\phi_a}(X) = \int \sqrt{\phi_a(x)}\,\sqrt{\phi_a(x)}\; x\; dx = x_0.$$

Vimos anteriormente que quanto menor o valor de a mais está concentrada a densidade em tôrno do ponto x_0.

No limite, quando $a \to 0$, a densidade ϕ_a vai convergir a Delta Dirac no ponto x_0, Neste caso limite, o x vai estar "concentrado"totalmente em x_0 e não vai haver dispersão alguma.

A medida de dispersão dos dados x em torno de x_0 podem ser medidos através da expressão normalizada

$$\sqrt{\int (x^2 - x_0^2)\,\phi_a(x)\,dx} = \sqrt{\int x^2\;\phi_a(x)\,dx\; -\; x_0^2}.$$

Neste caso, o valor acima é igual a a.

As expressões acima fazem sentido para uma densidade qualquer $\phi \geq 0$, $\phi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ (tal que $\int \phi(x)dx = 1$).

Assim, a média da posição espacial seria

$$E_\phi(X) = \int x\phi(x)dx.$$

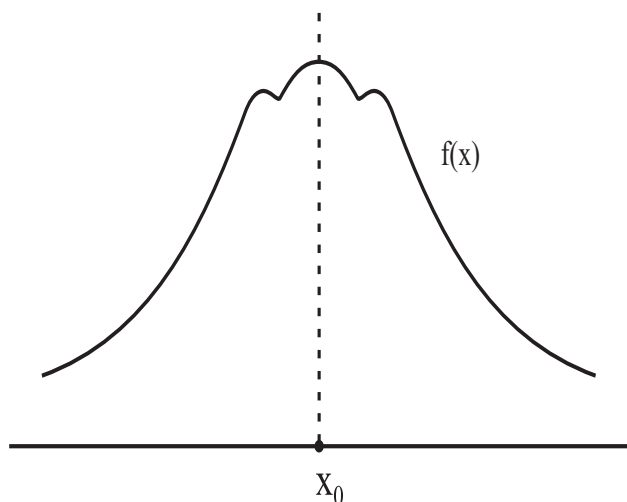



Figura 1.13: Densidade $f(x)$ com dados que possuem forte concentração em torno da média.

e, a dispersão em torno da média $E_\phi(X)$ seria dada pela expressão

$$\sqrt{\int x^2\,\phi(x)\,dx\; - \;E_\phi(X)^2}.$$

Quanto maior for este valor mais dispersos estão os valores de x em torno da média.

Nas figuras 1.13 e 1.14 apresentamos dois casos distintos: o primeiro mostra o gráfico de uma densidade f que possui pouca dispersão e segundo com muita dispersão em torno da média.

Estes conceitos tem análogos relevantes também na Mecânica Quântica.

Lembre que dado um operador autoadjunto B e um estado ψ temos que $E_\psi(B) =< B\psi, \psi >= \int B(\psi)(x)\,\overline{\psi(x)}\,dx$.

Definição 1.16. A dispersão de um observável A (autoadjunto portanto) em um estado ψ é dado por

$$\triangle_\psi(A) = [E_\psi(A^2) - E_\psi(A)^2]^{\frac{1}{2}} = \,E_\psi[\,(\,A - E_\psi(A)\,I)^2\,]^{\frac{1}{2}} =$$

$$[< (A - E_\psi(A)\, I)^2\, (\psi)\, ,\, \psi >]^{\frac{1}{2}} =$$

$$[< \,(A - E_\psi(A)\, I)(\psi)\, ,\, (A - E_\psi(A)\, I)\, (\psi) >]^{\frac{1}{2}} = |\, (A - E_\psi(A)\, I)(\psi)\, |.$$

Note que

$$E_\psi(A^2) - E_\psi(A)^2 =< \psi, A^2(\psi) > - < \psi, A(\psi) >^2 =$$

$$< A(\psi), A(\psi) > - < \psi, A(\psi) >^2 = |\, A(\psi)\, |^2 - < \psi, A(\psi) >^2 .$$

Ainda, $< \psi, A(\psi) >^2 \leq \ |\psi|^2\, |A(\psi)|^2 = |A(\psi)|^2$. Logo, $E_\psi(A^2) - E_\psi(A)^2 \geq 0$.

Suponha que preparássemos a partícula num estado ψ, e, fossemos medir o observável A, então, se a dispersão fosse muito pequena, isto significa que realizando repetidamente muitas vezes o experimento, observaríamos pouca variabilidade no resultado obtido.

Considere uma partícula quântica descrita pelo estado ψ. Suponha que ao observar a posição x_j, $j \in \{1, 2, .., n\}$, o valor esperado para o operador $\mathcal{X}_j$ fosse $x_0 \in \mathbb{R}$, e, sua dispersão fosse muito pequena, então, com alta probabilidade a partícula no estado ψ estaria próxima de x_0.

Vamos calcular o valor médio e a dispersão para o momento $\mathcal{P}$ quando consideramos $\varphi_n = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \sin(n\pi \frac{x}{a})$ (que é uma função de onda real diferenciável) no caso do exemplo 2) da seção anterior.

Ora, para qualquer $\psi \in \mathcal{H}$ diferenciável

$$E_\psi(\mathcal{P}) =< \psi|\mathcal{P}\psi >= -\hbar i \int_0^a \psi(x)\psi'(x)dx = -\hbar i \frac{1}{2}[\psi(a)^2 - \psi(0)^2] = 0$$

Ainda,

$$\triangle_\psi(\mathcal{P})^2 = E_\psi(\mathcal{P}^2) - 0 = E_\psi(\mathcal{P}^2).$$

Note que $\mathcal{P}^2(\varphi_n) = \hbar^2 \sqrt{\frac{2}{a}}\, \frac{n^2\pi^2}{a^2}\, \sin(n\pi\frac{x}{a})$, assim

$$\triangle_{\varphi_n}(\mathcal{P})^2 =< \varphi_n|\mathcal{P}^2(\varphi_n) >= \hbar^2\, \frac{2}{a}\, \frac{n^2\pi^2}{a^2}\, \int_0^a \sin(n\pi\frac{x}{a})^2\, dx =$$

$$\hbar^2\, \frac{2}{a}\, \frac{n^2\pi^2}{a^2}\, \frac{a}{2} = \hbar^2\, \frac{n^2\pi^2}{a^2}\, .$$

Proposição 1.9. $\triangle_\psi(A) = 0 \iff \psi$ *é autofunção de* A.

Demonstração. Seja α autovalor de A, então $A\psi = \alpha\psi$, sendo assim $E_\psi(A) = \frac{\langle\psi,\alpha\psi\rangle}{\|\psi\|^2} = \alpha$.

Desta forma

$$A(\psi) = E_\psi(A)\,\psi.$$

Ou seja, o autovalor é $E_\psi(A)$.

Suponha que $|\psi| = 1$.

Temos que por definição $E_\psi[(A - E_\psi(A)I)^2] = \triangle_\psi(A)^2$.

Ora, pela expressão equivalente descrita na definição

$$\triangle_\psi(A)^2 = |\,(\,A - E_\psi(A)\,I)(\psi)\,|^2 = |\,A(\psi) - E_\psi(A)\psi\,|^2$$

Portanto, $\triangle_\psi(A)^2 = 0 \iff A(\psi) = E_\psi(A)\,\psi$.

□

Dado um operador A se diz que o estado ψ pode ser medido com infinita precisão se $\triangle_\psi(A)^2 = 0$. Assim, se o estado ψ for preparado como uma autofunção de A teremos que ele pode ser medido través do observável A com precisão infinita. Como vimos antes se A e B comutam eles podem ser simultaneamente diagonalizáveis. Desta forma, se φ_n é um autovetor comum a A e B então ele pode ser medido com precisão infinita simultaneamente pelos observáveis A e B.

Lembre que pelo Postulado 4 as observações obtidas de um observável A só podem tomar valores nos autovalores de A (ou, no espectro).

Desta forma se formos observar A e colocarmos o estado exatamente numa autofunção ψ de A, então, os valores obtidos serão apenas $E_\psi(A)$.

O resultado acima justifica de certo modo o sentido do Postulado 4. As autofunções são estados sem dispersão, ou seja, estados do qual não existe ignorância estatística. Existe, prévio a uma observação, uma grande indeterminação ou ignorância estatística. Após a observação, ao se produzir um determinado autovalor, a nossa ignorância do resultado desapareceu.

Seja ψ um estado, vamos analisar os valores esperados e dispersão dos observáveis $\mathcal{X}_j$, $\mathcal{P}_j$, $j \in \{1, 2..., n\}$.

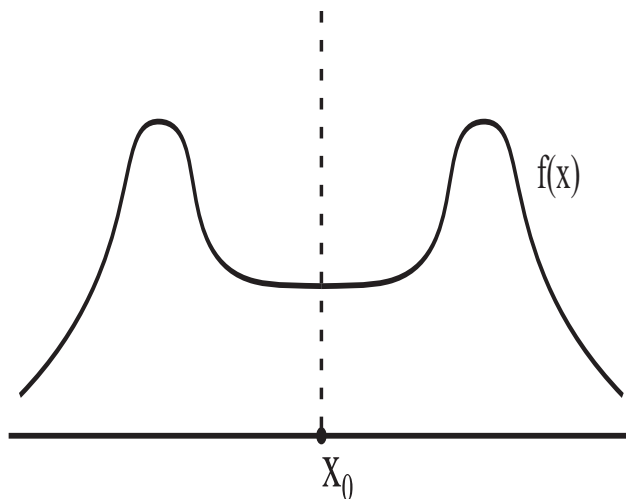



Figura 1.14: Densidade $f(x)$ com dados que possuem grande dispersão em torno da média. Alta probabilidade de encontrar valores bem distantes da média x_0,

Denotemos por $\langle \mathcal{X}_j \rangle_\psi$ e $\langle \mathcal{P}_j \rangle_\psi$ os valores esperados de, respectivamente, $\mathcal{X}_j, \mathcal{P}_j$. Então a dispersão destes operadores pode ser dada pelas seguintes fórmulas:

$$(\triangle_\psi \mathcal{X}_j)^2 = (\ \triangle \mathcal{X}_j\ )^2 = \langle\ (\ \mathcal{X}_j - \langle \mathcal{X}_j \rangle_\psi\, I\ )^2\ \rangle_\psi$$

e

$$(\triangle_\psi \mathcal{P}_j)^2 = (\ \triangle \mathcal{P}_j\ )^2 = \langle\ (\ \mathcal{P}_j - \langle \mathcal{P}_j \rangle_\psi\, I)^2\ \rangle_\psi.$$

Note que

$$(\Delta_\psi(\mathcal{P}_j))^2 = < \mathcal{P}_j(\psi), \mathcal{P}_j(\psi) > - < \psi, \mathcal{P}_j(\psi) >^2 =$$

$$< \widehat{\mathcal{P}_j(\psi)}, \widehat{\mathcal{P}_j(\psi)} > - < \hat{\psi}, \widehat{\mathcal{P}_j(\psi)} >^2 =$$

$$< p_j \hat{\psi}, p_j \hat{\psi} > - < p_j \hat{\psi}, \hat{\psi} >^2,$$

que é também a dispersão da variável clássica p_j no estado $\hat{\psi}$.

Teorema 1.10. *(Princípio da incerteza de Heisenberg)*
Para todo estado $\psi \in D(\mathcal{X}_j) \cap D(\mathcal{P}_j)$ vale que

$$\triangle \mathcal{X}_j \triangle \mathcal{P}_j \geq \frac{\hbar}{2}$$

Demonstração. Lembre que $\frac{i}{\hbar}[\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_k] = \delta_{jk} I$. Vamos supor, sem perda de generalidade que $\langle \mathcal{X}_j \rangle_\psi = \langle \mathcal{P}_j \rangle_\psi = 0$.

Isto pode ser feito porque se $< \psi, \mathcal{X}_j(\psi) >= a_j$ e $< \psi, \mathcal{P}_j(\psi) >= b_j$, poderíamos considerar $\tilde{\mathcal{X}}_j = (\mathcal{X}_j - \overline{a_j} I)$ e $\tilde{\mathcal{P}}_j = (\mathcal{P}_j - \overline{b_j} I)$. Considerando agora $\tilde{\mathcal{X}}_j$ e $\tilde{\mathcal{P}}_j$, o desenvolvimento a seguir poderia ser adaptado a este novo par de operadores.

Assim, $(\triangle \mathcal{X}_j)^2 = |\mathcal{X}_j(\psi)|^2$ e $(\triangle \mathcal{P}_j)^2 = |\mathcal{P}_j(\psi)|^2$.

Note que para dois operadores autoadjuntos A, B temos que
$\langle i[A,B] \rangle_\psi = 2\, Im \langle A\psi, B\psi \rangle$.

De fato,
$\langle i[A,B] \rangle_\psi = -i \langle \psi, AB\psi \rangle + i \langle \psi, BA\psi \rangle = -i \langle A\psi, B\psi \rangle + i \langle B\psi, A\psi \rangle =$
$= -i(\langle A\psi, B\psi \rangle - \overline{\langle A\psi, B\psi \rangle}) = 2\, Im \langle A\psi, B\psi \rangle$.

Desta forma, pela desigualdade de Cauchy-Schwartz

$$1 = \langle \psi, \psi \rangle = \langle \psi, \frac{i}{\hbar}[\mathcal{P}_j, \mathcal{X}_j]\psi \rangle = \frac{2}{\hbar}\, Im \langle \mathcal{P}_j \psi, \mathcal{X}_j \psi \rangle \leq \frac{2}{\hbar} |\langle \mathcal{P}_j \psi, \mathcal{X}_j \psi \rangle| \leq$$

$$\frac{2}{\hbar} \|\mathcal{P}_j \psi\| \|\mathcal{X}_j \psi\| = \frac{2}{\hbar} (\triangle \mathcal{P}_j)(\triangle \mathcal{X}_j).$$

Logo, $\triangle \mathcal{X}_j \triangle \mathcal{P}_j \geq \frac{\hbar}{2}$.

□

Como se sabe, $\mathcal{X}_j$ e $\mathcal{P}_j$ não comutam. Assim, fixado um estado ψ, ao observar a posição x_j e o momento p_j temos interferência na observação. A expressão acima $\triangle \mathcal{X}_j \triangle \mathcal{P}_j \geq \frac{\hbar}{2}$ nos fornece uma estimativa numérica do produto das respectivas dispersões.

Vamos elaborar sobre isto. Se fosse preparado um aparato que colocasse a partícula no estado ψ, e, se desejássemos medir simultaneamente a posição x_j e o momento p_j, então seria válida a expressão $\triangle \mathcal{X}_j \triangle \mathcal{P}_j \geq \frac{\hbar}{2}$. Desta forma, se conseguíssemos colocar a partícula num estado ψ, de tal forma que a posição x_j esteja muito bem concentrada

em torno de x_0, então a medição do momento p_j para tal ψ é tal que a dispersão não pode ser muito pequena.

Por exemplo, se a posição x_j fosse descrita por ψ que é a densidade Gaussiana de media 0 e variância (dispersão) a, então a distribuição da sua transformada de Fourier seria a densidade Gaussiana de media 0 e variância (dispersão) $\hbar\frac{1}{a}$. Note que se a é pequeno , então, $\hbar\,\frac{1}{a}$ é grande. Este resultado se torna muito natural aos olhos do Princípio da Incerteza.

A expressão $\mathcal{F}((2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}<p_0,x>}) = \delta_{p_0}(p)$ (no sentido de distribuições) indica que podemos pensar, de forma heurística, em $(2\pi\hbar)^{-\frac{n}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}<p_0,x>}$ como, o "estado"(infelizmente, não está em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)(dx)$) que descreve uma partícula como momento p_0 (e, com dispersão de $\mathcal{P}$ igual a zero) e tal que a média de $\mathcal{X}$ é igual a zero. A dispersão de $\mathcal{X}$ seria, num certo sentido, a máxima possível. Estas afirmações pictóricas corroboram o princípio da incerteza: $\triangle\mathcal{X}$ grande implica em $\triangle\mathcal{P}$ pequeno, e, vice-versa.

A análise do pacote Gaussiano é um pouco diferente do descrito acima.

Definição 1.17. O estado

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi a^2)^{n/4}}\, e^{\frac{-|x-x_0|^2}{4\,a^2}}\; e^{\frac{i}{\hbar}<p_0\,,x>}.$$

onde a é real positivo, e, $x_0, p_0 \in \mathbb{R}^n$, é chamado de pacote de ondas gaussiano. Algumas vezes se usa a terminologia: este estado esta micro-localizado em (x_0, p_0). Em função das unidades dimensionais da constante de Plank é natural tomar $a = \sqrt{h/m}$.

Referimos o leitor a [157] e [149] para uma análise bastante detalhada e com muitos exemplos dos tópicos em consideração.

O pacote de ondas gaussiano satisfaz as seguintes propriedades: $\triangle(\mathcal{X}) = a$, $E(\mathcal{X}) = x_0$, $E(\mathcal{P}) = p_0$ (ver (6.9) Chapter 6 page 182 [308]).

Note que

$$|\psi(x)|^2 = \frac{1}{(2\pi a^2)^{n/2}}\, e^{\frac{-|x-x_0|^2}{2\,a^2}} = \frac{1}{(2\pi\, h/m)^{n/2}}\, e^{m\,\frac{-|x-x_0|^2}{2\,h}}$$

é a densidade Gaussiana de média x_0 e variância (dispersão) $a = \sqrt{h/m}$. Assim, quando a massa é grande a dispersão é pequena.

Tal estado é chamado de pacote de onda (ou, pacote Gaussiano) situado em x_0 com dispersão $a = \sqrt{h/m}$. Estes estados minimizam a relação de incerteza de Heisenberg. Como veremos em breve vale a relação

$$\triangle(\mathcal{X})\,\triangle(\mathcal{P}) = \frac{\hbar}{2}.$$

Sendo assim, atinge o que melhor se pode esperar (devido ao Princípio da Incerteza) em termos de boa localização simultaneamente para x em torno se x_0 e ainda para p em torno de p_0.

O pacote de onda Gaussiano, para $m, x_0, p_0 = m\,v$, $n = 1$, é dado por

$$\psi_0(x) = \frac{m}{(2\pi\hbar)^{1/4}}\, e^{-\frac{m\,(x-x_0)^2}{4\,\hbar}}\, e^{\frac{i\,m\,v\,x}{\hbar}},$$

Ele descreve **o que se entende em Mecânica Quântica por uma partícula centrada em x_0, com momento $p = m\,v$, e , com dispersão** $\triangle_{\psi_0}(\mathcal{X}) = a$. Como vimos acima o parâmetro $a = \sqrt{\hbar/m}$ descreve a dispersão em torno de 0. Note que $|\psi_0(x)|^2$ determina um distribuição gaussiana de variância (dispersão) $a = \sqrt{\hbar/m}$.

Se o pacote Gaussiano tem pequena dispersão a vamos entender isto como a descrição de uma partícula "quase"clássica.

Existem outros pacotes de onda importantes. Uma discussão interessante e abrangente aparece em [70].

Vamos analisar a evolução temporal do pacote Gaussiano sob a ação do Hamiltoniano $\mathbf{H}_0$, ou seja, com potencial nulo.

Usando a expressão integral $\psi_t(x) = \mathcal{K}_t(\psi_0)(x)$, obtida anteriormente, podemos calcular (por exemplo via cálculo de resíduos [77])

$$\psi_t(x) = \frac{1}{(2\,\pi)^{1/4}}\,(\,a^2[1 + \frac{i\,\hbar\,t}{2\,ma^2}])^{-1/2} e^{\frac{i\,m\,x^2}{2\,\hbar\,t}}\, e^{m^2\,\frac{(x-v\,t)^2\,a^2}{2\,i\,m\,t\,\hbar\,a^2 - \hbar^2\,t^2}}.$$

Segue então que

$$|\psi_t(x)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}}(2\,(a^2 + \frac{\hbar^2\,t^2}{4\,m^2a^2}\,))^{-1/2}\, e^{-\frac{(x-v\,t)^2}{2\,(a^2+\frac{\hbar^2\,t^2}{4\,m^2a^2}\,)}}.$$

Uma conta fácil mostra que

$$E_{\psi_t}(\mathcal{X}) = v\,t = \frac{p}{m}\,t.$$

Assim, concluímos que o valor médio da posição da partícula quântica acompanha o que acontece com a partícula clássica.

A partir da expressão para $|\psi_t(x)|^2$ acima obtida, concluímos que otermo $a\,(1 + \hbar^2 \frac{t^2}{m^2 a^4}\,)^{1/2} = \triangle_{\psi_t}(\mathcal{X})$ representa a dispersão do estado ψ_t ao longo do tempo, e, que vai a infinito como t. Desta forma o comportamento da densidade ψ_t ao longo do tempo t, quando t fica muito grande, apresenta uma certa similaridade com o Movimento Browniano [200]. Mais tarde na seção 2.11 vamos fazer um paralelo da Mecânica Quântica com o Movimento Browniano e difusões.

Note que segue do descrito acima que $\triangle_{\psi_0}(\mathcal{X}) = a = \sqrt{\hbar/m}$.

Para t fixo o ponto de maior probabilidade de encontrar a partícula quântica é $x = v\,t$. Isto porque o valor da densidade $|\psi_t(x)|^2$ é máxima em $x = v\,t$. Obtemos assim uma certa analogia como o sistema clássico associado. De fato, note que se o potencial no sistema Hamiltoniano clássico for nulo, então a evolução temporal clássica da posição, a partir de uma condição inicial colocada em $x = 0$, e, com velocidade v, depois de um tempo t, será $x = v\,t$.

Lembre que $\mathcal{F}(e^{\frac{-x^2}{4a^2}}\, e^{-i\frac{p_0}{\hbar}\,x}) = \frac{\sqrt{2}\,a}{\hbar} e^{\frac{-\,a^2\,(p-p_0)}{\hbar^2}}$, e, assim, o momento do estado pacote de onda Gaussiano com média espacial 0, momento p_0 e dispersão a, no tempo $t = 0$, é descrito no espaço dos momentos pelo estado

$$\phi(p) = c\,e^{\frac{-\,a^2\,(p-p_0)}{\hbar^2}},$$

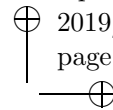
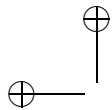
onde c é uma constante de normalização. Assim, $|\phi(p)|^2 = c^2\,e^{\frac{-2\;a^2\,(p-p_0)}{\hbar^2}}$.

Desta forma, se a localização do pacote em torno do $x = 0$ é muito intensa (pequena dispersão a), seu momento, por outro lado tem grande dispersão em torno de p_0 (se obtém o valor $\frac{\hbar}{2\,a}$). Assim, $\triangle_{\psi_0}(\mathcal{P}) = \frac{\hbar}{2\,a}$.

Desta forma, a partir das contas feitas acima, temos precisamente que $\triangle_{\psi_0}(\mathcal{X})\,\triangle_{\psi_0}(\mathcal{P}) = \frac{\hbar}{2}$. Ou seja, o pacote Gaussianao determina o valor mínimo possível dntro do requerido pelo Princípio da Incerteza.

Note que $a = \sqrt{h/m}$ e na seção 2.16 vamos considerar o limite semiclássico de um pacote Gaussiano e tal questão será relevante ao tomar $m \to \infty$ com $\hbar$ fixo..

Se considerássemos a família ϕ_t indexada por t dada por

$$\phi_t(x) = e^{-(x-vt)^2 + i\,k_0(x-vt)},$$

onde k_0, v estão fixos, e, t é variável, descreveríamos a evolução de um pacote de ondas não dispersivo. Ou, seja $\triangle(\phi_t)$ constante, e $E(\phi_t) = vt$. O pacote de onda se desloca com velocidade v.

Vamos agora calcular a energia do pacote de ondas Gaussiano no caso unidimensional. O pacote Gaussiano para $x_0 = 0$ é da forma

$$\psi_0(x) = A \exp^{ikx - x^2/(2\sigma)}$$

onde $A = \frac{1}{(2\,\pi a^2)^{1/4}}$, é a constante de normalização, e ainda $k = \frac{p}{\hbar}$ e $\sigma = 2\,a^2$.

Sabemos que

$$\psi_0^*(x)\psi_0(x) = |A|^2 \exp^{-x^2/\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi}\,a}\,\exp^{-x^2/\sigma}.$$

Neste cálculo, precisamos dos valores explícitos das seguintes integrais

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2/\sigma)dx = \sqrt{2\,\pi}\,a$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-x^2/\sigma)x^2 dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}\,\sigma^{3/2}$$

Ora,

$$\mathbf{H}_0\,\psi(x) = -(\hbar^2/2m)(d^2/dx^2)\psi(x)$$

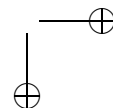
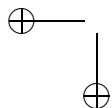
$$= -(\hbar^2/2m)[(ik - x/\sigma)^2 - 1/\sigma]\psi(x)$$

$$= (\hbar^2/2m)[k^2 - x^2/\sigma^2 + 2ikx/\sigma + 1/\sigma]\psi(x).$$

Sendo assim,

$$< \mathbf{H}_0 >_{\psi_0} = (\hbar^2/2m)[k^2 - < x^2 >_{\psi_0} /\sigma^2 + 2ik < x >_{\psi_0} /\sigma + 1/\sigma]$$

$$= (\hbar^2/2m)[(k^2 - (1/2\sigma) + 1/\sigma]$$

$$= (\hbar^2/2m)[k^2 + 1/(2\sigma)] = (\hbar^2/2m)[\,(\frac{p}{\hbar})^2 + 1/(4\,a^2)]$$

1.8 Operador densidade

Existe um espécie de dicionário em que os objetos clássicos tem seus correpondentes quânticos. Os pontos no cenário clássico são com deltas Dirac enquanto que no quântico são estados (a descrição formal da aleatoriedade da partícula), as funções (observáveis reais) correspondem a operadores autoadjuntos e finalmente as probabilidades vão corresponder aos operadores densidade.

Note que se φ_n for autofunção normalizada do operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$, então $\varphi_n\, e^{ia}$, $a \in \mathbb{R}$, também o será. Ainda, as densidades associadas a $|\varphi_n|^2$ e a $|\varphi_n\, e^{ia}|^2$ são as mesmas. Assim, existe uma certa ambiguidade na obtenção da densidade a partir da φ_n no caso da partícula estar no nível de energia λ_n.

Os operadores densidade, que são uma generalização dos estados (elementos no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$), permitem descrever de forma mais apropriada e elegante os conceitos que foram anteriormente analisados [291] [256].

Nesta seção vamos supor que os operadores considerados possuam um conjunto ortonormal completo.

Seja um operador $\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ que é autoadjunto, e, que possui um conjunto ortonormal completo enumerável denotado por φ_n, $n \in \mathbb{N}$. Vamos assumir que exista um autovalor mínimo. O traço, quando existir, é por definição, a soma de todos os seus autovalores λ_n. Os autovalores são sempre tomados com a indexação em n de tal forma que λ_n seja não decrescente. Estamos assumindo que esta soma

$$\sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n$$

seja finita (o que poderia no caso geral não acontecer). Denotamos por Tr (ρ) (quando existe) o traço do operador ρ. Os operadores "trace class"(ver seção 2 cap IX [76] ou seção 3.5 em [20]) serão o objeto da próxima seção e darão a classe de exemplos de operadores para os quais se consegue calcular o traço.

Observe que se A é autoadjunto, possui traço e se escreve como

$$A = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda_n\, P_{\varphi_n},$$

então o somatório acima é absolutamente convergente, isto é, vale a propriedade $\sum_{n=0}^{\infty} |\lambda_n \, P_{\varphi_n}| < \infty$ (lembre que uma operador projeção tem norma 1).

Fica assim descrito de maneira esquemática o que é o traço.

A definição abaixo é mais apropriada para futuras generalizações.

Definição 1.18. Suponha que o operador $\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ autoadjunto possua um conjunto ortonormal completo enumerável de autovetores φ_n, $n \in \mathbb{N}$, então o traço é dado por

$$\sum_n < \varphi_n, \rho \, \varphi_n > .$$

Mais geralmente, dado um operador A (não necessariamente auto-adjunto) por definição o traço de A é dado por

$$\sum_n < \varphi_n, \rho \, \varphi_n >$$

(quando existe) onde φ_n, $n \in \mathbb{N}$ é um conjunto ortonormal completo. O fato de que esta bem definido o traço (independente do conjunto ortonormal completo) será objeto do desenvolvimento subsequente

Se ρ_1 e ρ_2 são autoadjuntos, então fixado um conjunto ortonormal completo qualquer ϕ_n, $n \in \mathbb{N}$, o traço de $\rho_1 \circ \rho_2$ é por definição

$$\sum_n < \phi_n, (\rho_1 \circ \rho_2) \, \phi_n > .$$

O fato que está bem definido o traço de $\rho_1 \circ \rho_2$, e independe da escolha de ϕ_n, $n \in \mathbb{N}$, está assegurado pelo próximo resultado.

Antes disto observe o seguinte formalismo que é muito útil e que sera utilizado a seguir.

O operador projeção sobre o vetor unitário $v =< v| = |v >\in \mathcal{H}$ pode ser expresso na notação de Dirac como $P_v = | \, v \; >< \; v \, |$.

Lembre que mostramos na seção de pre-requisitos que

$$\sum_n \; |\phi_n >< \phi_n| \; = I$$

e também que

$$< P_\psi(\phi) \, , \, \theta > = << \phi|\psi > \; \psi, \theta > =$$

$$=< \phi, \psi >< \psi|\theta > = < \phi| \;\; |\psi >< \psi| \;\; |\theta >=< \psi|\theta >< \phi, \psi > \;\; (*).$$

Teorema 1.11. *Suponha que A e B são autoadjuntos e os traços de A, B, AB e BA estejam bem definidos. Então*

1) O traço de A, definido via a expressão $\sum_n < \varphi_n, A\varphi_n >$, não depende da escolha do conjunto ortonormal completo (mesmo que não seja constituído por autovetores).

2) $Tr\,(AB) = Tr\,(BA)$.

Demonstração. Seja $B = \sum_m a_m P_{\psi_m}$, e, ψ_n, $n \in \mathbb{N}$, um conjunto ortonormal completo (assim, dado o operador A podemos escrever $< A(\phi)| = \sum_m < A(\phi)|\,|\psi_m >< \psi_m|$).

Note que o somatório para B é absolutamente convergente.

Note que $\sum_m |\psi_m >< \psi_m| = I$.

Assim, se ϕ_n, $n \in \mathbb{N}$ é outro conjunto ortonormal completo vamos mostrar primeiro que

$$\sum_n < \phi_n|(A\,B)(\phi_n) >= \sum_m < \psi_m|(B\,A)(\psi_m) > . \qquad (1.6)$$

De fato, (usando (*) acima) temos que

$$\sum_n < \phi_n|(A\,B)(\phi_n) >= \sum_n < A(\phi_n)|B(\phi_n) >= \sum_n < A(\phi_n),\ I(B(\phi_n)) >$$

$$\sum_n \ < A(\phi_n)|\ \ [\sum_m |\,\psi_m >< \psi_m|\,]\,(\,B(\phi_n))\ >=$$

$$\sum_n \sum_m \ < A(\phi_n)|\ |\psi_m >< \psi_m|\ \ |B(\phi_n) >=$$

$$\sum_n \sum_m \ < \psi_m|B(\phi_n) >< A(\phi_n)|\psi_m >=$$

$$\sum_n \sum_m \ < B(\psi_m)|\phi_n >< \phi_n|A(\psi_m) > =$$

$$\sum_n \sum_m \ < B(\psi_m)\,(\,|\phi_n >< \phi_n|\,)\,|A(\psi_m) > =$$

$$\sum_m \ < B(\psi_m)\,(\,\sum_n |\phi_n >< \phi_n|\,)\,|A(\psi_m) > =$$

$$\sum_m \ < B(\psi_m)|\,I(A(\psi_m)\,)\ > = \sum_m \ < B(\psi_m)|A(\psi_m) >=$$

$$\sum_m < \psi_m|(B\,A)(\psi_m) > .$$

Acima usamos o fato que $\sum_n \, |\phi_n >< \phi_n| \, = I$.

Note que se dois somários são tais que cada um é absolutamente convergente, então se pode permutar os termos nos somatórios quando se faz o produto. Esta propriedade foi usada acima.

Para o item 1) tome $B = I$ e assim segue de (1.6) que

$$\sum_n < \phi_n|A(\phi_n) >= \sum_m < \psi_m|A(\psi_m) > .$$

O item 2) é consequencia de (1.6) e do item 1).

□

O descrito acima justifica o sentido da última definição.

Note que se ρ_1 e ρ_2 são autoadjuntos então $\sum_n \, < \phi_n, (\rho_1 \circ \rho_2)\, \phi_n >$ é um número real.

Observamos que estamos sendo um pouco informais no tratamento do traço no caso de dimensão infinita. Como destaca [86] (ver tambem [81]) na seção Precautions 2.2.2 tudo funciona de forma mais simples no caso de dimensão finita mas cuidados maiores são necessarios em dimensão infinita.

Definição 1.19. Um operador $\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é dito um operador densidade se ele é autoadjunto, se possui um conjunto ortonormal completo enumerável de autovetores, se é positivo, e, ainda, se tem traço igual a 1.

Neste caso todos os autovalores são números reais não negativos e mneores ou iguais a 1.

Os operadores densidade correpondem na Mecânica Quântica as probabilidades clássicas.

É natural associar o estado ψ - um elemento no espaço de Hilbert - ao operador densidade $P_\psi \, = \, |\, \psi >< \psi \,|$.

Note que ψ e $\psi \, e^{i\,a}$, com a real, definem o mesmo P_ψ. Em outras palavras temos que $|\, \psi >< \psi \,| = |\, \psi \, e^{i\,a} >< \psi \, e^{i\,a}\,|$. Ou seja, a ambiguidade do estado ψ desaparece quando olhamos o problema do ponto de vista de operador densidade.

Existem operadores densidade que não são projeções. Um operador densidade é uma projeção, se e só se, $\rho^2 = \rho$.

A matriz

$$\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\,i \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\,i & 1-\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

define um operador densidade agindo em $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$.

Suponha que $\mathcal{H}$ possua um conjunto ortonormal completo enumerável φ_n, $n \in \mathbb{N}$. Seja $c_n \geq 0$, $n \in \mathbb{N}$, sequencia tal que $\sum_n c_n = 1$. Então é fácil ver que $\rho = \sum_n c_n\, P_{\varphi_n}$ define um operador densidade. Note que $\rho^2 = \sum_n c_n^2\, P_{\varphi_n}$, e, assim, em geral, não é igual a ρ. Observe também que a composta de operadores densidade pode não ser um operador densidade.

A igualdade $\rho = \sum_n c_n\, P_{\varphi_n}$ expressa o fato que ρ é uma mistura dos operadores projeção P_{φ_n}

Note que se A_n, $n \in \mathbb{N}$, forem operadores densidade, e, c_n são numeros não negativos tais que $\sum_n c_n = 1$, então $\sum c_n\, A_n$ é um operador densidade. Assim, o espaço dos operadores densidade é um convexo - neste sentido.

É importante não confundir o **vetor** $\sum c_n\, \varphi_n$ no espaço de Hilbert com o **operador** densidade $\rho = \sum_n c_n\, P_{\varphi_n}$.

Observação Dado um operador densidade ρ (que pode ser expresso como $\rho = \sum_n c_n\, P_{\varphi_n}$ pelo teorema espectral), então, se ρ^2 for também operador densidade, deve ter traço igual a 1, logo, concluímos que todos os c_n, menos um deles, tem que ser zero. Assim, ρ é um operador projeção.

Para estimar a intensidade de que quão puro pode ser classificado o estado ρ podemos calcular o valor Tr (ρ^2) - denominado a pureza de ρ. No caso de matrizes densidade d por d observe que para a matriz $\rho = \frac{1}{d}\, I$ de maxima "mistura" obtemos o valor Tr $(\rho^2) = \frac{1}{d}$. (que é o valor de minima pureza). Para ρ um operador projeção obtemos o valor Tr $(\rho^2) = 1$ que é o de máxima pureza.

Os operadores densidade generalizam o conceito de estado e se encaixam de forma mais natural no ponto de vista de Heisenberg.

Note que se ρ é um operador densidade então

$$\rho(t) = e^{-t\,\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{H}}\,\rho\, e^{t\,\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{H}}$$

é autoadjunto, é positivo e tem traço 1 (demonstração ao fim desta seção).

Assim, $\rho(t)$, $t \geq 0$, descreveria a evolução de um operador densidade inicial ρ_0 através do fluxo descrito pela formulação de Schrodinger.

Neste caso, $\frac{d}{dt}\rho_t = -\frac{1}{\hbar}\, i[H, \rho(t)]$. Assim o gerador infinitesimal seria $\rho \to -\frac{1}{\hbar}\, i[H, \rho]$.

Fixados A_0 e ρ_0 iniciais, obtemos a dualidade das evoluções temporais

$$< A(t), \rho_0 >=< A_0, \rho(t) > .$$

Em Mecânica Estatística Quântica, como veremos nas seções 1.10 e 2.12, estaremos interessados, prioritariamente, em operadores densidade. Lá vai ser muito útil o fato que o operador $\mathbf{H}$, e a incógnita do problema (um operador densidade), sejam ambos operadores.

Os operadores densidade desempenham o papel das probabilidades na Teoria da Probabilidade. No nosso contexto, eles permitem capturar as interferências entre as distintas possibilidades. Se o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ fosse o $\mathbb{C}^3$, por exemplo, então, o operador autoadjunto geral é descrito por uma matriz A, três por três, com entradas complexas tal que a matriz transposta conjugada de A é igual a A (ver[222]). Um operador densidade é uma matriz positiva tal que a soma dos autovalores dá o valor 1. Sistemas desta forma aparecem de maneira natural em Computação Quântica (ver [264] [35] [33]).

Por exemplo, a matriz

$$P = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 \\ 0 & 0 & p_3 \end{pmatrix},$$

onde p_1, p_2, p_3 são reais não negativos, e, somam 1 é um exemplo de operador densidade

O mundo da Probabilidade, ou, da Mecânica Estatística, num certo sentido, está "mergulhado"no cenário Quântico, através das matrizes diagonais.

Muitas vezes os estados que somos levados a considerar são um mistura de estados φ_n que são autofunções do operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$.

Por exemplo, em algumas situações podemos ser levados a considerar dois operadores projeção P_{F_1} e P_{F_2}, $F_1, F_2 \in \mathbb{H}$, que atuam simultaneamente em estados ψ e que produzem novos estados $P_{F_1}(\psi)$ e

$P_{F_2}(\psi)$. Suponha que por alguma razão eles são produzidos com probabilidade 1/3 de sofrerem um processo de medição via $P_{F_1}(\psi)$, e, 2/3 de sofrerem um processo de medição via $P_{F_2}(\psi)$. Por alguma razão de natureza física eles vão estar sujeitos a uma observação subsequente A (sobre os outputs produzidos $P_{F_1}(\psi)$ e $P_{F_2}(\psi)$). Fixado ψ, temos que $1/3\, P_{F_1}(\psi) + 2/3\, P_{F_2}(\psi)$ é de fato uma função de onda que pode ser normalizada (e resultar num novo estado), mas isto não tem nada a ver com a questão em análise. No problema descrito acima existe uma ignorância de qual output vai agir o observável A. Esta situação não pode ser caracterizada pelo ponto de vista anterior em que apenas considerávamos estados (ou seja, elementos no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ de norma 1). O ponto sutil é: o operador $1/3\, P_{F_1} + 2/3\, P_{F_2}$ descreve esta ignorância (ou, incerteza).

Note também que $1/3\, P_{F_1} + 2/3\, P_{F_2}$ é, conceitualmente falando, distinto de $\psi = 1/3\, F_1 + 2/3\, F_2$, ou, mesmo de $P_{1/3\, F_1 + 2/3\, F_2}$.

Como dissemos antes um operador densidade deve ser encarado como a generalização natural ao sistema quântico (a nível de operadores) do conceito de probabilidade.

Definição 1.20. Dado um observável A, por definição, $Tr(\rho\, A)$ é o valor esperado de A quando o sistema quântico é descrito pelo operador densidade ρ. É usual denotar tal valor por $< A >_\rho$ ou $E_\rho(A)$.

Os operadores autoadjuntos desempenham na Mecânica Quântica o papel das funções na Teoria da Probabilidade. Assim, $E_\rho(A)$ corresponde a "integrar"a "função"A em relação a "probabilidade"ρ.

Lembre que $Tr(A\, \rho) = Tr(\rho\, A)$. Ainda, note que se ρ e A comutassem (assim seriam simultaneamente diagonalizáveis), na forma $\rho = \sum_n \lambda_n\, P_{\varphi_n}$ e $A = \sum_n c_n\, P_{\varphi_n}$, então, Tr $(\rho\, A) = \sum_n c_n \lambda_n$.

Se $\rho = P_\psi$, para um estado ψ, então $Tr(P_\psi\, A) = < A\psi \,|\, \psi >$. Assim, o conceito de valor esperado para operador é uma extensão daquele para estados.

De fato, supondo que $\psi = \sum_n a_n \phi_n$, temos quem pelo item 1) do Teorema 1.11

$$\mathrm{Tr}(P_\psi\, A) = \sum_n < (P_\psi\, A)\, \phi_n \,|\, \phi_n > = \sum_n < \psi\, |\phi_n > < A\phi_n \,|\, \psi > =$$

$$\sum_n a_n \; < A\phi_n \,|\psi > = < A \sum_n a_n\, \phi_n \,|\, \psi > = < A(\psi), \psi > = E_\psi(A).$$

Desta forma a extensão do conceito está justificada.

Vamos apresentar uma interpretação do significado da ação de um operador densidade ρ sobre um observável A.

A uma densidade $\rho = \sum_j p_j P_{\psi_j}$ podemos associar as probabilidades das medições λ_i a serem obtidas quando aplicamos o observável $A = \sum_i P_{v_i} \lambda_i$ da seguinte maneira: suponha $\psi_j = \sum_i c_{ji} v_i$ onde $\{v_i\}$ é a base ortonormal de autovetores de A.

Então podemos dizer que o observável A associa a ρ a probabilidade $\sum_j p_j |c_{ji}|^2$ da medição λ_i ser obtida.

Note que a interpretação acima é justificada pelo fato de que

$Tr(A\rho) = Tr(A(\sum_j p_j \rho_{\psi_j})) = \sum_j p_j Tr(A\rho_{\psi_j})) = \sum_j p_j \sum_i |c_{ji}|^2 \lambda_i = \sum_i (\sum_j p_j |c_{ji}|^2) \lambda_i$.

Olhando as expressões $\psi_j = \sum_i c_{ji} v_i$ e $\sum_j p_j |c_{ji}|^2$ seria razoável pensar que $|c_{ji}|^2$ descreve a probabilidade de ψ_j passar a v_i.

Observação: O desenvolvimento acima mostra que se ρ é operador densidade e A é operador positivo, então $Tr(A\rho) = E_\rho(A)$ é um número positivo.

Seja A um operador autoadjunto e ρ operador densidade (ambos agindo no mesmo espaço de Hilbert).

Suponhamos que o espectro de A seja contituido apenas por autovalores e com cardinalidade finita, ou seja, $\sigma(A) = \{\lambda_1, \lambda_2, .., \lambda_n\}$.

Os valores observados de $A = \sum_j \lambda_j P_{\phi_j}$ são os elementos do espectro.

A regra de Born é a seguinte: se o sistema é descrito pelo operador densidade ρ e se fazem medições (que são descritas pelo operador A) então a probabilidade de se observar λ_j é

$$P_A(\lambda_j) = \text{Traço} \;\; (\rho \, P_{\phi_j}),$$

onde P_{ϕ_j} é o operador projeção no espaço de autovetores associados ao autovalor λ_j.

Um exemplo para esclarecer o leitor sobre o assunto: para um sistema quântico que se encontra em equilíbrio termodinâmico com um reservatório de calor, se sabe que este ocupa níveis de energia (e assim,

determina diferentes estados no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$) de acordo com uma certa distribuição de probabilidade (nestes níveis) de acordo com a assim chamada Lei de Boltzmann. Vamos elaborar sobre isto mais tarde na seção 1.10 e 2.12. É natural assim tratar com operadores densidade e não com estados.

Considere o exemplo em que $\mathcal{H} = \mathbb{C}^3$, e que o operador densidade é diagonal

$$P = \begin{pmatrix} p_1 & 0 & 0 \\ 0 & p_2 & 0 \\ 0 & 0 & p_3 \end{pmatrix}.$$

Um observável B é uma matriz autoadjunta. Assuma que B é diagonal:

$$B = \begin{pmatrix} b_1 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & 0 \\ 0 & 0 & b_3, \end{pmatrix}.$$

onde b_1, b_2, b_3 são reais.

Note agora que traço $(B\,A)= p_1\,b_1 + p_2\,b_2 + p_3\,b_3$. Esta expressão pode ser entendida como a integral da função $b : \{1, 2, 3\} \to \mathbb{R}$, tal que $b(i) = b_i$, $i = 1, 2, 3$, em relação a probabilidade P em $\{1, 2, 3\}$, associada ao valores p_1, p_2, p_3. Assim, a expressão $Tr(B\rho) = E_\rho(B)$, que descreve a integração do observável B em relação ao operador densidade ρ, é uma generalização natural do cenário probabilístico.

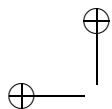
Fica claro então que o cenário probabilístico se encontra dentro do cenário quântico via as matrizes diagonais. As matrizes complexas não diagonais permitem descrever as interferências (componente fundamental na Mecânica Quântica).

O conjunto dos operadores densidade é um conjunto convexo. De fato, suponha que ρ_1 e ρ_2 sejam operadores densidade e

$$\rho = a\rho_1 + (1 - a)\,\rho_2,$$

onde $a \in [0, 1]$. Então, $\rho^* = a\rho_1^* + (1 - a)\,\rho_2^* = a\rho_1 + (1 - a)\,\rho_2$ o que implica que ρ é autoadjunto.

Ainda, $< \rho(v), v >=< (a\rho_1 + (1 - a)\,\rho_2)(v), v >= a\ < \rho_1(v), v >$ $+(1 - a)\ < \rho_2(v), v > \geq 0$.

Definição 1.21. Um operador densidade ρ é dito ser um estado puro se ele não pode ser escrito como combinação convexa não trivial de outros

operadores densidade. Ou seja, se ρ nao pode ser escrito como

$$\rho = aM_1 + (1-a)\, M_2,$$

onde $0 < a < 1$, e M_1 e M_2 são operadores densidade.

Teorema 1.12. *O conjunto dos operadores densidades que são estados puros é o conjunto dos operadores projeção.*

Demonstração. Primeiro vamos mostrar que operadores projeção são estados puros.

Seja ψ no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ e suponha por contradição que consideremos a combinação convexa

$$P_\psi = aM_1 + (1-a)\, M_2,$$

onde, $0 < a < 1$.

Seja F o subespaço unidimensional gerado por ψ.

Considere a decomposiçao $\mathcal{H} = F + F^\perp$.

Seja $\varphi \in F^\perp$. Então como M_1 e M_2 são operadores positivos, temos que

$$a\ < M_1(\varphi), \varphi > \leq a\ < M_1(\varphi), \varphi > + (1-a)\ < M_2(\varphi), \varphi >=$$

$$< P_\psi(\varphi), \varphi >= 0.$$

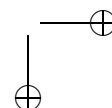
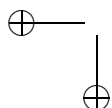
Assim, para todo $\varphi \in F^\perp$, temos que $< M_1(\varphi), \varphi >= 0$.

Afirmamos que um operador positivo A satisfaz a relação: $\forall \varphi, \phi$

$$| < A(\varphi), \phi > |^2 \ \leq < A(\varphi), \varphi > < A(\phi), \phi > .$$

Vamos demonstrar esta afirmação ao fim da prova do Teorema.

Assim, tomando acima $A = M_1$ e ϕ qualquer, obtemos $< M_1(\varphi), \phi >= 0$, e assim que M_1 é constante igual a zero em $F^\perp$. Como M_1 é autoadjunto, ele deixa também invariante o subespaço vetorial F (o orthogonal a $F^\perp$ conforme referencia [222]). Como o traço de M_1 é igual a 1 concluímos que $M_1(\psi) = P_\psi$. Logo a combinação convexa deve ser trivial.

Seja agora um operador densidade ρ que é um estado puro. Seja $\rho = \sum_{n\geq 0} \lambda_n\, P_{\varphi_n}$ sua decomposição espectral. Como ele é positivo

e seu traço é igual a 1, temos que $\lambda_n \geq 0$, e $\sum_n \lambda_n = 1$. Suponha que existam λ_i e λ_j não nulos. Assim, $\rho = \lambda_i P_{\varphi_i} + \sum_{n\neq i} \lambda_n P_{\varphi_n} = \lambda_i P_{\varphi_i} + (1-\lambda_i)\,[\frac{1}{1-\lambda_i}\sum_{n\neq i} \lambda_n P_{\varphi_n}]$. Como ρ é puro temos contradição.

Vamos mostrar agora que operador positivo A satisfaz a relação: $\forall \varphi, \phi$

$$|< A(\varphi), \phi >|^2 \; \leq < A(\varphi), \varphi >< A(\phi), \phi > .$$

Para um valor real s qualquer temos que

$$< A(\varphi + s\phi)\,, (\varphi + s\phi) > \geq 0.$$

Para um t qualquer tome $s = t \, < A(\varphi)\,, \phi >$.

Neste caso,

$$0 \leq \; < A(\varphi + s\phi)\,, (\varphi + s\phi) >= t^2\,|< A(\varphi)\,\phi >|^2 < A(\phi)\,, \phi > +$$

$$2\,t\,|< A(\varphi)\,, \phi >|^2 + \; < A(\varphi)\,, \varphi > .$$

Note que $< A(\varphi + s\phi)\,, (\varphi + s\phi) >$ é real, bem como $\int A(\varphi)\,\overline{\varphi}\,dx$ e $\int A(\phi)\,\overline{\phi}\,dx$.

Isto força com que o polinômio acima tenha apenas coeficientes reais.

Sendo assim o discriminante do polinômio de grau dois em t é negativo

$$4\,|< A(\varphi), \phi >|^4 - 4\,|< A(\varphi), \phi >|^2 \; < A(\phi), \phi >< A(\varphi), \varphi > \leq 0.$$

Disto segue a afirmação desejada.

□

Um operador densidade pode sempre ser expresso na forma

$$\rho = \sum_n \lambda_n\, P_{\varphi_n},$$

onde φ_n é um conjunto ortonormal completo enumerável. Os λ_n devem ser encarados como probabilidades e somam 1. Assim ρ pode ser expresso como combinação de estados puros. Note que ρ pode ser expresso - via um somatorio como acima - de infitintas formas diversas.

De qualquer maneira, se necessario se pode sempre escrever ρ na forma

$$\rho = \sum_n p_n \, P_{\varphi_n},$$

onde, $\sum_n p_n = 1$.

Fixado um operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$, nesta formulação mais geral, consideramos um operador densidade inicial ρ_0 no tempo $t = 0$, e, desejamos descrever a evolução temporal do operador ρ_t que satisfaz a equação

$$i\hbar \, \frac{d}{dt} \rho_t = [\mathbf{H}, \rho_t].$$

A derivação em t acima usa a estrutura de espaço de Banach dos operadores limitados com a norma de operadores.

Esta equação generaliza $i\hbar \, \psi'(t) = \mathbf{H}(\psi(t))$.

A solução de forma explícita é

$$\rho_t = e^{-t \, \frac{i}{\hbar} \, \mathbf{H}} \, \rho_0 \, e^{t \, \frac{i}{\hbar} \, \mathbf{H}}.$$

Note que se ρ_0 é um operador densidade, então, o ρ_t dado pela expressão acima também é um operador densidade.

A formulação acima é consistente com a anterior. De fato, se $\rho_0 = P_{\psi_0}$, onde $\psi_0 \in \mathcal{H}$ é um estado, então, se ψ_t satisfaz a equação de Schrödinger como condição inicial ψ_0, temos que

$$\psi(t) = e^{t \, \frac{1}{i\hbar} \, \mathbf{H}}(\psi_0) = e^{-t \, i \, \frac{1}{\hbar} \, \mathbf{H}}(\psi_0).$$

Vamos mostrar que para todo $t \geq 0$ vale $\rho_t = P_{\psi_t}$.

Ora, $P_{\psi(t)} = |\psi(t) \; >< \; \psi(t)|$, satisfaz para qualquer ϕ, η

$$< \eta | P_{\psi(t)}(\phi) > = < \eta | \psi(t) > < \; \psi(t) | \phi > .$$

Note que

$$P_{\psi_0} | e^{t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} \phi > = |\psi_0 >< \psi_0 | e^{t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} \phi > = |\psi_0 >< e^{-t \frac{i}{\hbar} \mathbf{H}} \psi_0 | \phi > = |\psi_0 >< \psi(t), \phi > .$$

Por outro lado como $e^{-t \, \frac{i}{\hbar} \, \mathbf{H}} |\psi_0 > = |e^{-t \, \frac{i}{\hbar} \, \mathbf{H}} \, \psi_0 >$

$$< \eta | e^{-t \, \frac{i}{\hbar} \, \mathbf{H}} \, P_{\psi_0} \, e^{t \, \frac{i}{\hbar} \, \mathbf{H}}(\phi) > = < \eta | \psi(t) >< \psi(t) | \phi > .$$

Como as duas expressões são as mesmas para todo ψ e η concluímos que para todo t vale $P_{\psi(t)} = \rho_t$.

Desta forma fica mais uma vez natural pensar que a evolução temporal de operadores (formulação de Heisenberg) generaliza a evolução temporal de estados (formulação de Schrödinger).

1.9 Operadores Trace Class

Uma ótima referencia para os assuntos desta seção e da próxima é [20].

Todo operador autoadjunto positivo A possui uma raiz quadrada B, isto é, existe um operador B tal que $B^2 = A$ (ver final da seção de pre-requisitos).

Dado um operador $\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ sempre temos que o operador $\rho^*\rho$ é positivo.

Assim, como $\rho\,\rho^*$ é um operador autoadjunto positivo ele possui raiz quadrada $(\rho\,\rho^*)^{1/2}$. Isto é $(\,(\rho\,\rho^*)^{1/2}\,)^2 = (\sqrt{\rho\,\rho^*})^2 = \rho\,\rho^*$.

Notação: $|\rho| = \sqrt{\rho^*\rho}$

Desta forma

$$\langle \rho^*\rho\phi, \phi\rangle = \langle \rho\phi, \rho\phi\rangle \geq 0, \forall \phi \in \mathcal{H}.$$

No caso em que $\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é limitado podemos definir alternativamente o operador positivo $|\rho| = \sqrt{\rho^*\rho}$ via série de potências [76] [296].

Definição 1.22. Um operador limitado $\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ é dito trace class operator se para qualquer base ortonormal $\{\psi_j\}$ de $\mathcal{H}$ vale que

$$\sum_j |\,\langle \psi_j, |\rho|\psi_j\rangle\,| < \infty.$$

Neste caso podemos definir, dada a base $\{\psi_j\}$, o traço do operador ρ como sendo

$$tr\rho = \sum_j \langle \psi_j, \rho\psi_j\rangle\,.$$

Esta definição não depende da escolha do conjunto ortonormal completo escolhido em $\mathcal{H}$ (ver definição 3.4.2 em [20]).

Exemplo 1.1. Seja $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um operador com espectro puramente pontual, $\sigma(A) = \sigma_p(A)$. Sejam ψ_n e E_n os autovetores de A e seu respectivos autovalores. Se $E_n \geq 0$ então A é trace class se e só se

$$\sum_j \langle \psi_j, |A|\psi_j\rangle < \infty \Leftrightarrow \sum_j \langle \psi_j, |E_j|\psi_j\rangle < \infty \Leftrightarrow \sum_j E_j < \infty.$$

Os operadores trace class formam um espaço de Banach com a norma

$$\|A\|_1 = tr\,|A| = tr(A\,A^*)^{1/2} = \sum_j \left\langle \psi_j\,,\,(A\,A^*)^{1/2}\psi_j \right\rangle$$

que satisfaz as propriedades:

1. $tr(\alpha A + \beta B) = \alpha tr A + \beta tr B$, $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ e $\forall A, B$ trace class;
2. se ρ é trace class e A é um operador limitado então ρA e $A\rho$ são trace class e $tr \rho A = tr A \rho$.

Seja $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ um operador limitado, auto-adjunto, com espectro puramente pontual. Sejam também $E_0 \leq E_1 \leq ...$ os autovalores de A e ψ_n, $n = 0, 1, ...$, os respectivos autovetores que formam um conjunto ortonormal completo. Se $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ é uma função analítica temos

Proposição 1.13. *$f(A)$ é trace class e*

$$tr f(A) = \sum_j f(E_j)$$

se a série converge absolutamente.

Demonstração. Supondo que a série $\sum_j f(E_j)$ é absolutamente convergente temos

$$\sum_j \langle \psi_j, |f(A)| \psi_j \rangle = \sum_j \langle \psi_j, |f(E_j)| \psi_j \rangle = \sum_j |f(E_j)| < \infty$$

de modo que $f(A)$ é trace class e portanto podemos calcular o traço

$$tr f(A) = \sum_j \langle \psi_j, f(A) \psi_j \rangle = \sum_j f(E_j).$$

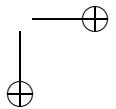
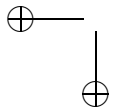
Proposição 1.14. *Seja $K : [a, b]^2 \to \mathbb{C}$ uma função contínua tal que $K(x, y) = \overline{K(y, x)}$. O operador $\mathcal{K} : L^2([a, b]) \to L^2([a, b])$ definido por*

$$(\mathcal{K} f)(x) = \int_a^b K(x, y) f(y) \, dy$$

é autoadjunto, e, é trace class. Ainda, vale

$$tr \mathcal{K} = \int_a^b K(x, x) \, dx.$$

Demonstração.

O operador $\mathcal{K}$ é compacto (ver seção X.2 [345] e Teorema 3.4.4 em [20]).

Seja φ_n, $n \in \mathbb{N}$, conjunto enumerável completo de autovetores para $\mathcal{K}$. Sejam ainda, λ_n, $n \in \mathbb{N}$, os respectivos autovalores.

Seja $B(x,y) = \sum_n \lambda_n \varphi_n(x) \overline{\varphi_n(y)}$.

Considere o operador $\mathcal{B}$ tal que

$$(\mathcal{B}f)(x) = \int_a^b B(x,y) f(y) \, dy.$$

Ora, para cada k fixo

$$(\mathcal{B}\varphi_k)(x) = \int_a^b \sum_n \lambda_n \varphi_n(x) \overline{\varphi_n(y)} \varphi_k(y) \, dy = \sum_n \lambda_n \varphi_n(x) \int_a^b \overline{\varphi_n(y)} \varphi_k(y) \, dy =$$

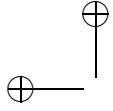
$$\sum_n \lambda_n \varphi_n(x) \overline{< \varphi_n, \varphi_k >} = \lambda_k \varphi_k(x)$$

Como os φ_k, $k \in \mathbb{N}$, geram o espaço de Hilbert, então, $\mathcal{K} = \mathcal{B}$. Logo, podemos assumir que $K = B$.

Ora,

$$\int_a^b K(x,x) dx = \int_a^b \sum_n \lambda_n \varphi_n(x) \overline{\varphi_n(x)} dx = \sum_n \lambda_n < \varphi_n, \varphi_n >= \sum_n \lambda_n = tr\mathcal{K}.$$

Referimos o leitor a seção 9.2.2 em [85] para um discussão mais profunda sobre os tópicos que estamos superficialmente abordando.

Proposição 1.15. *Seja $K : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{C}$ uma função contínua tal que $K(x,y) = \overline{K(y,x)}$. Suponha que $\int \int |K(x,y)|^2 dx \, dy < \infty$. O operador $\mathcal{K} : L^2(\mathbb{R}) \to L^2(\mathbb{R})$ definido por*

$$(\mathcal{K}f)(x) = \int K(x,y) f(y) \, dy$$

é autoadjunto, e, é trace class. Ainda, vale

$$tr\mathcal{K} = \int K(x,x) \, dx.$$

A demonstração é semelhante ao caso anterior.

Sendo assim, se um certo operador pode ser descrito via um operador integral obteremos automaticamente uma forma simples de calcular seu traço.

Definição 1.23. Um operador limitado $\mathcal{K}$ é dito de Hilbert-Schmidt se $\mathcal{K}^*\mathcal{K}$ é trace class.

Proposição 1.16. *Um operador integral $\mathcal{K}$ em $L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ com núcleo $K \in L^2\left(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d\right)$ é de Hilbert-Schmidt, e*

$$tr\mathcal{K}^*\mathcal{K} = \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d} |K\left(x,y\right)|^2 dxdy.$$

Referimos o leitor a [20] para maiores detalhes sobre operadores do tipo Hilbert-Schimdt.

O valor $\sum_{k\in\mathbb{N}} < e_k, A(e_k) >$, denotado por $\tau(A)$ é chamado neste caso de traço A.

Um espaço de Hilbert é separável se ele admite uma conjunto ortonomal completo (enumerável).

Definição 1.24. Um operador autoadjunto A agindo num espaco de Hilbert separável $\mathcal{H}$ é chamado Hilbert-Schmidt (ver [291] section IV.8), se a soma

$$\sum_{k\in\mathbb{N}} \lambda_k^2$$

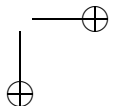
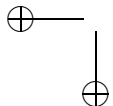
converge.

Teorema 1.17. *Um operador A definido num espaço de Hilbert separável $\mathcal{H}$ é Hilbert-Schmidt, se e só se, $A^*\,A$ é trace class.*

Teorema 1.18. *Suponha que $\{e_1, e_2, ...\}$ é um conjunto ortonormal em $\mathcal{H}$.Se*

$$A(.) = \sum_k |e_k > \lambda_k < e_k|\,.\, >,$$

onde $\lambda_k \geq 0$, $tr(A) < \infty$, e A_0 é um operador limitado, então $A_0\,A$ é trace class.

Considere V o conjunto dos operadores trace class no espaço de Hilbert $\mathcal{L}^2(M,\mathbb{C})$ com norma $|u|_1 =$ trace $\sqrt{u^*\,u} = tr(\sqrt{u^*\,u})$. Fica assim definido um espaço vetorial completo (ver [52]). Note que mesmo que u não seja positivo, temos que $u\,u^*$ está bem definido, é positivo e tem raiz quadrada. Denote por K o conjunto dos operadores trace class. Note que se $u \in K$, então $tr(u) = |u|_1$. Lembre que $tr(A\,B) = tr(B\,A)$. Sabemos que se $u \in K$ então ele é operador densidade no caso em que $tr(u) = 1$.

Note que $tr : V \to \mathbb{R}$ é um operator linear.

Seja $\mathcal{H}$ um espaço de Hilbert e V o conjunto dos operadores tipo Hilbert-Schmitd com a norma $|A|_2 = \sqrt{tr(A^* A)}$.

Defina $< A, B >= tr(A^* B)$ para $A, B \in V$. São válidas quase todas a propriedades para que $<,>$ seja produto interno. (ver seção 6 em [142])

É natural considerar a seguinte analogia: os operadores trace class (com a norma $| \,.\, |_1$) correpondem ao espaço $\mathcal{L}^1$ e os operadores Hilbert-Schmitd (com a norma $| \,.\, |_2$) ao espaço $\mathcal{L}^2$.

Lembramos que um conjunto C num espaço vetorial é um cone se cada elemento $x \in C$ é tal que toda vez que o escalar $\lambda > 0$, então $\lambda\, x$ está tambem em C.

O conjunto K de operadores positivos é um cone (ver [52]).

Proposição 1.19. *[85] Todo operador trace-class num espaço de Hilbert é tipo Hilbert-Schmidt.*

1.10 Mecânica Estatística Quântica

Existe um generalização natural da Mecânica Estatística ao cenário dos sistemas quânticos (ver por exemplo [52] [156] [160] [256] [265]). As medidas de Gibbs vão corresponder aos estados KMS.

Primeiro, para motivar o problema no cenário quantico apresentaremos o modelo mais simples que ocorre na Mecânica Estatística. Considere um sistema físico com estados $\{1, \ldots, n\}$, e sejam $-U_1, \cdots - U_n$ as energias desses estados, respectivamente. Suponha que colocamos o sistema em contato com uma fonte de calor muito maior, que está a uma temperatura T. Sendo assim, a energia irá transitar entre o sistema original e a fonte de calor, e a temperatura T permanecerá constante, pois a fonte tem ordem de grandeza muito maior que o nosso sistema. O problema físico que estamos considerando não é determinístico, e nós podemos apenas falar da probabilidade de um certo estado fixo, digamos j, ocorrer, onde $j \in \{1, 2, .., n\}$. Apos esperar que o sistema se encontre em equilibrio, se realizarmos uma sequência de observações, notaremos que o estado j irá ocorrer numa determinda proporção de vezes.

Por exemplo, se fizermos 1000 observações e em 112 delas aparece o estado 2, diremos que existe evidência de que 2 tem probabilidade $P_2 = \frac{112}{1000}$.

Então o que queremos saber, para cada j, é o valor dessa proporção quando o número de observações vai a infinito. É um fato conhecido da Mecânica Estatística (a partir de observações do fenômeno físico) que a probabilidade P_j de que o estado j ocorra é dado pela **distribuição de Gibbs** ou **medida de Gibbs**:

$$P_j = \frac{e^{-BU_j}}{\sum_{i=1}^n e^{-BU_i}} \ j \in \{1, ..., n\},$$

onde $B = \frac{1}{kT}$ e k é uma constante, chamada **constante de Boltzmann**.

Uma formulação variacional do que foi dito acima pode ser feita da seguinte maneira. Seja

$$F(p_1, \dots, p_n) = -\sum_{i=1}^n p_i \log p_i - \sum_{i=1}^n p_i B U_i$$

definida no simplexo em $\mathbb{R}^n$ dado por

$$\Lambda = \left\{ (p_1, \dots, p_n) : p_i \geq 0, i \in \{1, ..., n\}, \sum_{i=1}^n p_i = 1 \right\}$$

Usando multiplicadores de Lagrange, podemos mostrar que o máximo de F no simplexo Λ é obtido em

$$P_j = \frac{e^{-BU_j}}{\sum_{i=1}^n e^{-BU_i}} \ j \in \{1, \dots, n\},$$

ou seja, de acordo com o valor P_j dado acima.

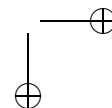
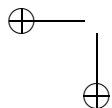
A função

$$S(p_1, \dots, p_n) = -\sum_{i=1}^n p_i \log p_i$$

é a **entropia** da distribuição $(p_1, ..., p_n)$. Defina

$$U(p_1, ..., p_n) = -\sum_{i=1}^n p_i U_i$$

como sendo a **energia média**. Então podemos dizer que a distribuição de Gibbs maximiza o valor

$$S(p_1, ..., p_n) \ - \ BU(p_1, ..., p_n)$$

Nesse contexto, a expressão $S - BU$ é o que chamaremos de **energia livre**. Logo, podemos dizer que a natureza maximiza a energia livre. Quando fazemos a temperatura T tender a $+\infty$, isto é, se B tender a 0, vamos nos aproximar de um problema em que apenas se maximiza a entropia.

Alternativamente, podemos também dizer que o estado de Gibbs minimiza $-(S - BU)$.

Na seção 2.12 vamos descrever um exemplo interessante em que a teoria acima é descrita com bastante detalhes.

Após a análise do sistema mais simples como o descrito acima, vamos considerar sua generalização ao caso quântico. A teoria que trata deste assunto se chama Mecânica Estatística Quântica [52].

Definição 1.25. Dado um operador densidade $\rho = \sum_n p_n P_{\varphi_n}$ definimos a entropia de von Neumann de ρ como

$$S(\rho) = -\text{Tr}\,(\rho \log \rho),$$

onde $\log \rho$ é o operador

$$\log \rho = \sum_n (\log p_n)\, P_{\varphi_n}.$$

Podemos escrever de forma alternativa

$$S(\rho) = -\sum_n p_n \log p_n.$$

A entropia de um estado puro (um operador projeção) é sempre nula, ou seja, a menor possivel.

No caso bidmensional um ρ da forma $\rho = 1/2\, P_{\psi_1} + 1/2 P_{\psi_2}$, onde P_{ψ_1} e P_{ψ_2} são operadores projeção, é tal que sua entropia $\log 2$ é máxima.

Outros conceitos de entropia são descritos na literatura (por exemplo em [265] e [25]).

Vamos supor que o sistema quântico em consideração esta sob a ação de um Hamiltoniano $\mathbf{H}$.

Desta forma, dado um operador densidade ρ, o seu valor esperado é denotado por $E(\rho) = \text{Tr}\,(\mathbf{H}\rho) = < \mathbf{H} >_\rho$.

Definição 1.26. Fixada uma temperatura T, a energia livre de Helmholtz do operador densidade ρ é por definição

$$F_T(\rho) = E(\rho) - TS(\rho).$$

O operador de equilíbrio à temperatura T para $\mathbf{H}$ seria o operador densidade ρ que minimiza tal $F_T(\rho)$ entre todos os possíveis operadores densidade.

Este problema também pode ser enunciado como: maximizar $-\frac{1}{T}\,E(\rho)+S(\rho)$ entre possíveis operadores densidade ρ.

Pode-se mostrar (ver prova ao fim da da seção 2.6) que o operador densidade ρ_T que minimiza a energia livre de Helmholtz é dado por

$$\rho_T = \frac{1}{Z(T)}\, e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}},$$

onde, $Z(T) = \text{Tr}\,(e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}})$. Naturalmente, se exige que o este traço esteja bem definido. Como veremos mais tarde na seção 2.12, no caso do oscilador harmônico, isto de fato acontece.

Referencias abrangentes sobre estes assuntos são [52] e [264].

Definição 1.27. A expressao $\frac{1}{Z(T)}\, e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}}$ é denominada de estado (operador densidade) KMS (ou, de Gibbs) à temperatura T para o operador Hamiltoniano $\mathbf{H}$. Note que $\frac{1}{Z(T)}\, e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}}$ é um operador densidade.

Assim, o operador densidade de equilíbrio à temperatura T para $\mathbf{H}$ é o estado de Gibbs à temperatura T para $\mathbf{H}$.

Note que se H fosse diagonal da forma

$$H = \begin{pmatrix} U_1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{pmatrix},$$

onde U_1, U_2 são reais, então $\frac{1}{Z(T)}\, e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}}$, descreve a probabildade com pesos

$$P_1 = \frac{e^{-\frac{1}{T}U_1}}{e^{-\frac{1}{T}U_1} + e^{-\frac{1}{T}U_2}},\ \ P_2 = \frac{e^{-\frac{1}{T}U_2}}{e^{-\frac{1}{T}U_1} + e^{-\frac{1}{T}U_2}},$$

através de

$$\rho_T = \frac{1}{Z(T)}\, e^{-\frac{1}{T}\mathbf{H}} = \begin{pmatrix} \frac{e^{-\frac{1}{T}U_1}}{e^{-\frac{1}{T}U_1}+e^{-\frac{1}{T}U_2}} & 0 \\ 0 & \frac{e^{-\frac{1}{T}U_2}}{e^{-\frac{1}{T}U_1}+e^{-\frac{1}{T}U_2}} \end{pmatrix}$$

A entropia deste operador é dada por $-P_1 \log P_1 - P_2 \log P_2$.

Na Mecânica Quântica as inferências desempenham papel fundamental. Como vemos, o cenário da Mecânica Estatística Clássica esta contido neste através das matrizes diagonais.

Vamos elaborar mais sobre este tópico na seções 2.7 e 2.12.

1.11 Uma generalização da Teoria de Hamilton-Jacobi

Seja $\psi_t : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$, que satisfaz a equação de Schrödinger i.e,

$$i\,\hbar\,\frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbf{H}\psi = -\frac{\hbar^{\mathbf{2}}}{\mathbf{2\,m}}\,\triangle\psi + \mathbf{V}(\mathbf{x})\psi.$$

Vamos considerar o sistema indexado pela massa $m > 0$ e também por $\hbar$.

Vamos escrever $\psi(t,x) = \psi_{m,\hbar}(t,x)$ na forma polar

$$\psi(t,x) = a(t,x)\,e^{\frac{i}{\hbar}\,S(t,x)} = a_{m,\hbar}(t,x)\,e^{\frac{i}{\hbar}\,S_{m,\hbar}(t,x)},$$

onde $a = a_{m,\hbar}$ e $S = S_{m,\hbar}$ tomam apenas valores reais e $m > 0$. No tempo t o termo $|a_{m,\hbar}|^2$ descreve a densidade da partícula quântica de massa m e o termo $S_{m,\hbar}$ a fase da partícula quântica.

Dado $S(t,x)$ denotamos $\nabla S(t,x) = (\frac{\partial S(t,x)}{\partial x_1},...,\frac{\partial S(t,x)}{\partial x_n})$

Teorema 1.20. $\psi_t = ae^{\frac{i}{\hbar}\,S} = a_t e^{\frac{i}{\hbar}\,S_t}$*, satisfaz a equação de Schröndinger, se e só se,*

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{|\nabla S|^2}{2\,m} + V = \frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\triangle a}{a}, \tag{1.7}$$

e

$$\frac{\partial (a^2)}{\partial t} + \ div(\,\frac{a^2 \nabla S}{m}\,) = 0. \tag{1.8}$$

Demonstração. Para demonstrar o resultado desejado, note primeiro que

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (\frac{1}{a}\frac{\partial a}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\,\frac{\partial S}{\partial t})\,\psi,$$

e

$$(\frac{\partial \psi}{\partial x_1},...,\frac{\partial \psi}{\partial x_n}) = \nabla\psi = (\frac{\nabla a}{a} + \frac{i}{\hbar}\,\nabla S)\psi.$$

Disto segue que

$$\triangle\psi = (\frac{\hbar^2\,\triangle a}{a} + i\,\hbar\,\triangle S + 2i\,\hbar\,\frac{< \nabla a, \nabla S >}{a} - \frac{i}{\hbar^2}|\nabla S|^2\,)\,\psi.$$

Substituindo estas expressões na equação de Schrödinger obtemos

$$i\,\hbar\,\frac{\partial \psi}{\partial t} = (\frac{i\,\hbar}{a}\frac{\partial a}{\partial t} - \ \frac{\partial S}{\partial t})\,\psi =$$

$$[\,-\frac{1}{2\,m}\,(\frac{\hbar^2\triangle a}{a} + i\hbar\,\triangle S + 2i\hbar\,\frac{< \nabla a, \nabla S >}{a} - |\nabla S|^2\,)\, + V\,]\,\psi.$$

Após dividir as duas expressões acima por ψ, e, ao igualar a parte real e imaginária de cada um dos lados obtemos

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{|\nabla S|^2}{2\,m} + V = \frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\triangle a}{a},$$

e

$$i\,\hbar\,\frac{1}{a}\,\frac{\partial a}{\partial t} = -i\hbar\,\frac{1}{2m}\triangle S - 2i\hbar\frac{1}{2\,m}\frac{< \nabla a, \nabla S >}{a}.$$

Multiplicando a última expressão por $\frac{2\,a^2}{i\hbar}$, obtemos

$$\frac{\partial(a^2)}{\partial t} = \,-\mathrm{div}\,(\,\frac{a^2\nabla S}{m}\,).$$

Desta forma fica demonstrada a afirmação acima.

□

Este par de equações que mencionamos acima pode ser obtido via um problema variacional e alguns entendem que tal procedimento esta dentro da linha da assim chamada Mecânica de Bohm (ver [334]). Na seção 2.18 vamos considerar tal questão.

Este ponto de vista da Mecânica Quântica algumas vezes é denominado de interpretação hidrodinâmica (ver [161]). Está relacionado com a interpretação estocástica de E. Nelson (ver [263] and [341])

Para determinar uma solução $S(x,t), a(x,t)$ é necessário - ao menos - fixar uma condição inicial $S(0,x)$, $a(0,x)$ onde $\int a(0,x)^2\,dx = 1$.

Note que vai seguir deste resultado que se assumirmos que ψ_t é estacionária, ou seja, está na forma

$$\psi_t(x) = a(x)e^{\frac{i}{\hbar}\,[\,S(x)-E\,t\,]} = a_m(x)e^{\frac{i}{\hbar}\,[\,S_m(x)-E\,t\,]},$$

onde E é constante, então ψ_t satisfaz a equação de Schrödinger, se e só se, para todo x vale

$$-E + \frac{|\nabla S(x)|^2}{2\,m} + V(x) = \frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\triangle a(x)}{a(x)},$$

e

$$\text{div}\,(\,\frac{a^2(x)\nabla S(x)}{m}\,) = 0.$$

A última expresão indica que a densidade $a(x)^2$ não depende de t.

Observamos que a hipótese de estacionaridade implica assumir que $a(x)e^{\frac{i}{\hbar}\,S(x)}$ seja um autovetor de $\mathbf{H}$ associado ao autovalor E.

Mais detalhes sobre a equação de Hamilton-Jacobi em Mecânica Quântica podem ser encontrados em [94] e em [88].

Em [108] o par de equações acima aparecem de maneira natural ao se considerar o princípio de ação crítica para o funcional de Guerra-Morato.

Exemplo: No caso unidimensional podemos tomar acima $S = 0$, e, então basta encontrar a função real $a(x)$ tal que

$$-E + V(x) = \frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\triangle a(x)}{a(x)}.$$

Esta equação é equivalente a equação linear de segunda ordem

$$\frac{d^2}{dx^2}a(x) - \frac{2m}{\hbar^2}(V(x) - E)\,a(x) = 0.$$

Como exigimos que $\int a(x)^2 dx = 1$, temos que a vai a zero quando x vai a mais infinito e a menos infinito.

A equação acima tem sempre solução $a(x)$ sob hipoteses razoáveis sobre V. A condição de que a vai a zero quando x vai a mais infinito e a menos infinito fixa condições de fronteira que determinam os possiveis valores de E.

Assim, no caso unidimensional, este procedimento mostra como calcular autofunções de $\mathbf{H}$. Na seção 1.6 ao fim do exemplo 3 analisamos tal caso com detalhes.

Vamos analisar agora com mais cuidado no caso geral a expressão

$$\frac{\partial(a(t,x)^2)}{\partial t} + \text{div}(\frac{a(t,x)^2(\frac{\partial S(t,x)}{\partial x_1},...,\frac{\partial S(t,x)}{\partial x_n})}{m}) = \frac{\partial(a^2)}{\partial t} + \text{div}(\frac{a^2\nabla S}{m}) = 0.$$

Em dinâmica de fluídos esta equação descreve a evolução de uma massa fluída com densidade de massa a^2 e que vai se mover no ponto x na direção do vetor tangente $\nabla S(x)$.

A conservação de densidade de massa nos dá a expressão

$$\operatorname{div}\left(\frac{a^2 \nabla S}{m}\right) = 0.$$

Faremos aqui um paralelo com cenário quântico. Lembre que na Mecânica Quântica $a(t,x)^2 = a_t(x)^2$ vai descrever a probabilidade de encontrar em x a partícula no tempo t numa certa região espacial dada. Assim esta densidade vai evoluir ao longo do tempo seguindo a direção do gradiente de S (no tempo t) que é a parte ondulatória da função de onda.

Assim, a evolução da distribuição de massa na Mecânica de Fluídos possui um paralelo com a evolução da probabilidade de encontrar a partícula numa certa região na Mecânica Quântica. Vamos elaborar um pouco mais sobre isto.

Teorema 1.21. *Seja uma família de difeomorfismos $T_t : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $t \in \mathbb{R}$, onde $T_0 = I$, e, $v_t(x)$, que satisfaz*

$$v_t(T_t(x)) = \frac{d\,T_t(x)}{dt},$$

$x \in \mathbb{R}$, $t \in \mathbb{R}$. Seja, uma densidade inicial $f(x)$, e, ρ_t a evolução temporal desta densidade ao longo do fluxo definido pela familia de difeomorfismos T_t, isto é, para qualquer função diferenciavel com suporte compacto φ e qualquer t, temos que

$$\int \varphi(x)\, \rho_t(x)\, dx = \int \varphi(T_t(x))\, f(x)\, dx.$$

Note que $\rho_0(x) = f(x)$ para todo x.

Então vale a equação do transporte

$$\frac{d}{dt}\rho_t + \frac{d}{dx}\,(v\,\rho_t) = 0.$$

Demonstração. Sem perda de generalidade (basta tomar limites após obtido o resultado desejado) se pode assumir que φ tem suporte compacto.

Note que para todo x

$$\frac{d}{dt}(\varphi \circ T_t) = [\frac{d}{dx}\varphi(T_t(x))]\,\frac{dT_t(x)}{dt} = [\frac{d}{dx}\varphi(T_t(x))]\, v_t(T_t(x)).$$

Assim, como podemos passar a derivada para dentro da integral

$$\int \varphi(x)\frac{d}{dt}\rho_t(x)\,dx = \frac{d}{dt}\int \varphi(x)\,\rho_t(x) = \frac{d}{dt}\int \varphi(T_t(x))\,f(x)\,dx =$$

$$\int [\frac{d}{dx}\varphi(T_t(x))\,]\,v_t(T_t(x))f(x)\,dx = \int [\frac{d}{dx}\varphi(x)\,]\,v_t(x)\,\rho_t(x)\,dx =$$

$$-\int \varphi\frac{d}{dx}[\,v_t(x)\,\rho_t(x)\,]\,dx.$$

Na ultima passagem usamos integração por partes, e, ainda, o fato φ tem suporte compacto.

Como a afirmação vale para todo φ temos finalmente que

$$\frac{d}{dt}\rho_t \;=\; -\frac{d}{dx}\,(\,\rho_t\,v\,).$$

□

Acima $v = \nabla S$ na equação do transporte anteriormente obtida.

A prova do resultado acima vale também para uma família de difeomorfismos $T_t : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$. Suponha que $v : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ seja um campo de vetores autônomo e considere o fluxo Φ_t, $t \in \mathbb{R}$, associado a equação diferencial $x' = v(x)$ (ver [97]). Neste caso as hipoteses acima estão satisfeitas e, fixada uma densidade inicial ρ_0, então a evolução temporal desta densidade pelo fluxo é dada pela equação de transporte para ρ_t, $t \in \mathbb{R}$.

Alguns comentários sobre a equação de Hamilton-Jacobi na Mecânica Clássica: para determinar a solução $S(x,t)$ é necessario fixar uma condição inicial $S_0(x) = S(0,x)$. Mesmo supondo $S_0(x)$ de classe C^∞ em x, a propriedade que, para um dado sistema mecânico clássico, se tenha uma evolução $S(t,x)$, via equação do transporte descrita por ∇S_t - onde S_t esta definida e diferenciável em todo $\mathbb{R}^n$ e para todo t - é em geral forte demais. Além disso a equação diferencial associada a $v_t = \nabla S_t$ não é muitas vezes autonoma. O aparecimento de pontos de cáustica - em algum ponto $t > 0$ - (ver [307], [7], [2], [250] ou seção 3 em [228]) impõe restrições ao problema. De qualquer forma o resultado acima ilustra o papel desempenhado pela equação de transporte na teoria.

Podemos então interpretar, no caso unidimensional, a relação de $S(t,x)$ com $\rho_t = a_t^2$ (que aparecem na expressão da função de onda)

da seguinte forma: se $f(x) = a_0^2(x)$ é a condição inicial, e, T_t é o fluxo que vai definir a correspondente evolução temporal da densidade $a_t^2 = \rho_t$, via a equação de Schrödinger, então

$$\frac{\partial(a^2)}{\partial t} + \frac{d}{dx}\left(\frac{a^2 \frac{d}{dx} S}{m}\right) = 0,$$

significa que $\frac{d}{dt} T_t(x) = v_t(x) = \frac{\frac{d}{dx} S(t,x)}{m}$. Ou seja, no caso n-dimensional $\frac{\nabla_x S(t,x)}{m}$ aponta na direção da variação da densidade de probabilidade a_t^2 no ponto x.

Vamos continuar a analisar a expressão geral

$$\frac{\partial S(t,x)}{\partial t} + \frac{\left(\left(\frac{\partial S(t,x)}{\partial x_1}\right)^2 + ... + \left(\frac{\partial S(t,x)}{\partial x_n}\right)^2\right)}{2\,m} + V(x) = \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{|\nabla S|^2}{2\,m} + V(x) =$$

$$\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\triangle a}{a} = \frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\left(\frac{\partial^2 a(t,x)}{\partial x_1^2} + ... + \left(\frac{\partial^2 a(t,x)}{\partial x_n^2}\right)\right)}{a(t,x)}.$$

Definição 1.28. A equação diferencial

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{|\nabla S|^2}{2\,m} + V(x) = 0, \tag{1.9}$$

é conhecida em Mecânica Clássica como a equação de Hamilton-Jacobi para a ação $S(t,x)$.

É natural supor que $S(x,t)$ é da forma $S(x,t) = -E\,t + S(x)$ e isto simplifica equação acima: a equação de Hamilton-Jacobi estacionária é

$$\frac{|\nabla S(x)|^2}{2\,m} + V(x) = E. \tag{1.10}$$

Em geral não existem funções diferenciáveis solucionando tal equação. Referimos o leitor a [9], [2] e a seção 3 em [228] para resultados gerais sobre esta equação e sua relação com Mecânica Clássica.

Alguns autores consideram a condição $\hbar \to 0$ como a aproximação da Mecânica Quântica ao cenário da Mecânica Clássica (ver [154]). Mais precisamente, para t fixo, a distribuição de probabilidade de $|\psi_t(x)|^2$

- onde ψ_t satisfaz a equação de Schorodinger com $\hbar$ variável - deveria descrever, de alguma forma, um sistema mecânico clássico.

Não há de nossa parte nenhum reparo a este formalismo do ponto de vista matemático. Mas, na nossa opinião, não faz muito sentido do ponto de vista da Física, pois em um momento $\hbar$ é uma constante fundamental da teoria e em outro é uma variável. No nosso modesto entendimento, este ponto de vista não é corroborado por algum princípio físico convincente conforme discussão em [195] (ver também [169]). Na verdade uma constante ϵ "dimensionless", como explicado por C. Sparber em [318], é que corresponde ao formalismo matematico correto fazendo $\epsilon \to 0$ no limite semiclassico na equação

$$i\, \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial t}(t,x) = -\frac{\epsilon^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2 \psi(t,x)}{\partial x^2} + V(x)\,\psi(t,x).$$

Excelentes textos matemáticos tratam do assunto (ver [154], [203], [94] e [351]). Abordamos o assunto em algumas seções (por exemplo nas seções 2.10 e 2.14).

Parece fazer mais sentido considerar um estado quantico como dependente da massa e fazer o limite (semi-clássico) quando a massa vai a infinito com $\hbar$ fixo. Como vimos na seção 1 deste capítulo no caso do ground state isto funciona perfeitamente.

Por exemplo, na excelente exposição [173] and [174] o limite assintótico pode ser entendido como supondo que a massa vai a infinito. Neste trabalho é analisado a medida assintótica no limite semiclássico do ground state para um potencial diferenciável numa variedade Riemanniana.

O assim chamado cell problem esta naturalmente relacionado com questões de Limite semi-clássico. Referencias em que se analisam tais questões do ponto de vista da Teoria de Aubry-Mather (ver [119]) são [12], [108], [234], [144].

Em algumas seções (como por exemplo quando consideramos a integral de Feymann) vamos analisar então o limite $\hbar \to 0$ do ponto de vista estritamente matemático. Observamos que $a_{m,\hbar}$ e $S_{m,\hbar}$ são soluções de uma equação diferencial que depende conjuntamente dos parâmetros $m, \hbar$.

Desta forma, não se pode afirmar sem maiores cuidados (de forma simplista) que quando $\hbar \to 0$, temos que as soluções da equação

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{|\nabla S|^2}{2\,m} + V = \frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\triangle a}{a},$$

vão ter como limite as soluções da equação (1.9) acima. A expressão

$$\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\triangle a_{m,\hbar}}{a_{m,\hbar}}(t,x),$$

quando $\hbar \to 0$, pode não ir a zero se não for possivel controlar o crescimento de $a_{m,\hbar}$ e $S_{m,\hbar}$ com $\hbar$. Não estamos afirmando que não é possível controlar $a_{m,\hbar}$ e $S_{m,\hbar}$, apenas alertamos que é necessário algum tipo de cuidado nas hipóteses sobre como variam (ou, não) m, $\hbar$, etc... (ver seção 3.2 e cap 4 em [12] ou [94], [110], [108], [154], [351] e [144]).

Uma classe de problemas associado a este limite assintótico é algumas vezes tratado pelo método WKB e das expansões asintóticas (ver [34], [163] and [203]).

O limite semiclássico considerando um intervalo de tempo $[0,T]$ fixado é abordado de outra forma na seção 1.13 (em particular, fazemos algumas considerações pertinentes no último parágrafo desta mencionada seção).

Faremos a seguir algums considerações heurísticas seguindo este ponto de vista. Assim, a expressão

$$\frac{\partial S_{m,\hbar}}{\partial t} + \frac{|\nabla S_{m,\hbar}|^2}{2\,m} + V = \frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\triangle a_{m,\hbar}}{a_{m,\hbar}},$$

indica que que quando $h \to 0$, a solução $S_{m,\hbar}(t,x)$ fica ”parecida”com a ação clássica $S_\infty(t,x)$ (que é solução da equação (1.9)).

No limite semiclássico obteríamos (otimisticamente) então o par de equações em a_∞ e S_∞

$$\frac{\partial S_\infty}{\partial t} + \frac{|\nabla S_\infty|^2}{2\,m} + V = 0,$$

e

$$\frac{\partial (a_\infty^2)}{\partial t} + \operatorname{div}\left(\,\frac{a_\infty^2 \nabla S_\infty}{m}\,\right) = 0.$$

Seja S_∞ a ação clássica para o Hamiltoniano autônomo clássico $H(x,p) = \frac{|p|^2}{2\,m} + V$. Se assumirmos, via separação de variáveis, que $S_\infty(x,t) = W(x) - E\,t$, obtemos a equação de Hamilton-Jacobi na forma

$$\frac{|\nabla W(x)|^2}{2\,m} + V(x) = E,$$

e a equação de transporte

$$\operatorname{div}\left(\frac{a_\infty^2 \nabla W}{m}\right) = 0.$$

Note que foi essencial aqui supor que o Hamiltoniano é autônomo.

No caso em que o potencial é nulo obtemos a equação da eikonal [228]: fixado E, determine W tal que

$$\frac{|\nabla W(x)|^2}{2\,m} = E.$$

O nível de energia E é o conjunto de pontos (x, p) tais que vale

$$\frac{|p|^2}{2\,m} + V(x) = E.$$

A x-projeção do nível de energia E é o conjunto dos x tais que existe p tal que $\frac{|p|^2}{2\,m} + V(x) = E$.

Na figura 1.6 pode se observar no caso unidimensional os possíveis valores x que podem ser atingidos quando esta fixo um certo nível de energia E. Fixado um nível de energia E sejam $x_a^E < x_b^E$ os extremos deste intervalo.

É fácil ver, pelo Teorema de Conservação da Energia total, que

$$W(x) = \int_{x_a}^{x} \sqrt{2\,m\,[\,E - V(y)\,]}\,dy$$

satisfaz a equação de Hamilton-Jacobi

$$\frac{|\nabla W(x)|^2}{2\,m} + V(x) = E.$$

Note que $W(x) = -\int_{x_a}^{x} \sqrt{2\,m\,[\,E - V(y)\,]}\,dy$ também satisfaz a equação.

No limite semiclássico, quando $\hbar \to 0$, seria natural esperar que a $S^\hbar$, associada a cada $\hbar$, vá convergir a esta W.

Nos pontos x_a e x_b a função W deixa de ser diferenciável. Algumas vezes se chama tais pontos de pontos de dobra. A função W não está assim (ao menos de maneira natural) definida de forma diferenciável

em toda a reta real. As soluções KAM fracas descrevem uma maneira alternativa de tratar com tais patologias [75].

W é chamada de solução KAM fraca da equação de Hamilton-Jacobi se W é diferenciável fora de um conjunto de medida de Lebesgue 0 na x-projeção do nível de energia E, e, vale $\frac{|\nabla W(x)|^2}{2\,m} + V(x) = E$ (onde definido) [116] [75]. Neste caso, sempre existe solução KAM fraca da equação de Hamilton-Jacobi (sob algumas condições bem gerais sobre V).

A sigla KAM se refere a Kolomogorov, Arnold and Moser que deram contribuições muito importantes na formalizaçao desta Teoria.

Fixado m e o correspondente a_m (obtido da equação de Schrödinger) considere um novo potencial $V_m(x) = V(x) - \frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\triangle a_m(x)}{a_m(x)}$.

Definição 1.29. $-\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\triangle a(x)}{a(x)}$ é chamado de potencial quântico associado a $\mathbf{H}$ e ao estado $\psi = a\, e^{\frac{i}{\hbar}S}$.

A seguir vamos considerar um novo Hamiltoniano $H_m(x,p)$, definido para (x,p) em $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ dado por

$$H_m(x,p) = \frac{|p|^2}{2m} + V_m(x) = \frac{|p|^2}{2m} + [\,V(x) - \frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\triangle a_m(x)}{a_m(x)}\,].$$

É fácil ver que a equação de Hamilton-Jacobi em S_m para o Hamiltoniano H_m é a equação

$$\frac{\partial S_m}{\partial t} + \frac{|\nabla S_m|^2}{2\,m} + V = \frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\triangle a_m}{a_m}.$$

Vamos fazer agora algumas digressões sobre o ponto de vista de encarar um dado sistema descrito pela Mecânica Quântica como um sistema oriundo da Mecânica Clássica ao qual adicionamos o potencial quântico ao potencial clássico.

Em outras palavras, podemos pensar na existência de um novo potencial $V_{m,\hbar}$ (diferente de V ao adicionar o potencial quântico), e que este, de certa forma, descreve sob o ponto de vista clássico o cenário quântico.

A ação clássica $S(t,x)$ é descrita da seguinte forma: fixe um ponto $x' \in \mathbb{R}^n$, e, considere uma solução da equação de Hamilton $(x(s),p(s))$, $s \in [0,t]$, tal que,

1) $x(0) = x'$

2) $x(t) = x$.

Note que o caminho $(x(s), p(s)) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ depende de x e x', e, que poderia não ser único (mas, fizemos acima a escolha de **uma determinada solução da equação de Hamilton**). Naturalmente será necessário que x e x' estejam na projeção de um mesmo nível de energia.

A seguir defina (ver seção 3.8 em [228])

$$S(t,x) = \int_0^t [< p(s)\,,\, \frac{d}{ds}x(s) > - H(x(s), p(s))\,]ds.$$

Vamos supor que tal função está bem definida para x próximo de x', para t em uma vizinhança de $t = t'$ fixado, e ainda que S é diferenciável em t e x. Observamos que se pode encontrar tal S num certo domínio de definição [228]. O problema que atrapalha para se obter uma S globalmente definida são os assim chamados pontos conjugados (que aparecem também em Geometria Diferencial) também chamados de pontos de cáustica (vamos considerar tais questões nas seções 2.13, 2.14 e 2.15). Referimos o leitor ao exemplo 2.3.1 e também a seção 3 de [228] para maiores discussões sobre o assunto.

No caso do oscilador harmonico, $H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\,w^2\,x^2}{2}$, fixado T e os pontos inicial x e final y a ação ligando

$$S(x,y,T) = \frac{w}{2\sin(w\,T)}\,[(x^2+y^2)\,\cos(w\,T) - 2\,xy].$$

Para cada x' fixo, tal função ação $S(t,x)_{x'} = S(t,x,x')$ satisfaz a equação de Hamilton-Jacobi para o Hamiltoniano H fixado (ver seção 3.9 in [228]). Assim, é natural identificar $S(t,x,x') = S_\infty(t,x,x')$.

Note que $\sin(w\,T)$ pode se anular quando $w\,T$ for múltiplo inteiro de π. Nestes pontos temos que $S(x,y,T) = \infty$.

Pode-se demonstrar da mesma forma, que o S_m (satisfazendo a equação clássica de Hamilton-Jacobi) acima descrito também pode ser obtido via criticalidade de

$$S_m(t,x) = \int_0^t [< p(s)\,,\, \frac{d}{ds}x(s) > - H_m(x(s), p(s))\,]ds,$$

para (t,x) em uma vizinhança de x' e t' (supondo estarem satisfeitas as hipótese mencionadas acima) onde H_m incorpora o potencial quântico.

Note que o termo H_m contém a_m. Assim, a afirmação precisa é: uma vez que ”tivéssemos”encontrado a_m (que assumimos satisfaz a equação

de Shrodinger), então S_m satisfaz a relação acima. No caso quântico, como necessitamos resolver simultaneamente um par de equações em a_m e S_m, a relação acima não é muito efetiva para se encontrar soluções explícitas.

Vamos estender um conceito que já foi descrito anteriormente: fixados x, x', t e t', então $S(t, t', x, x')$ será definido da seguinte forma: escolha uma solução da equação de Hamilton $(x(s), p(s))$, $s \in [t, t']$, tal que,

1) $x(t) = x$

2) $x(t') = x'$.

O caminho $(x(s), p(s)) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ depende de t, t', x e x', e, poderia não ser único (mas, fizemos acima uma escolha). Naturalmente será necessário que x e x' estejam na projeção de um mesmo nível de energia.

A seguir defina a integral da ação (ver seção 3.8 em [228])

$$S(t, t', x, x') = \int_t^{t'} [< p(s) \, , \, \frac{d}{ds} x(s) > - H(x(s), p(s))] ds.$$

Vamos supor que tal função está bem definida para y próximo de x, ainda, y' próximo de x', para r em uma vizinhança de t, e, r' numa vizinhança de t'. Suponha ainda que S é diferenciável em t, t' e x, x'. Observamos que se pode encontrar tal S num certo domínio de definição [228].

Uma ilustração pictórica da interpretação de $S(t, t', x, x')$ é a seguinte: um jogador de tênis recebe a bolinha no tempo t na posição x (do seu lado da quadra de tênis) e deseja bater na raquete (isto requer a escolha de um vetor p no tempo t, e, que vai determinar a trajetória $(q(s), p(s))$ e colocar assim a bolinha de volta na outra parte da quadra de tênis na posição x' e no tempo t'.

Assim, $S(t, t', x, x')$ descreveria a integral da "ação"desta escolha de trajetória da bolinha determinada pelo tenista.

Fixando x', t', temos que $S(t, t', x, x')$ satisfaz a equação de Hamilton-Jacobi, logo, é natural identificar $S = S_\infty$.

Uma outra expressão interessante que envolve S_∞ e a_∞ é a seguinte: se

$$a_\infty^2 = \det \left(\frac{\partial^2 S_\infty}{\partial x \partial x'}\right),$$

então, vale a equação de continuidade

$$\frac{\partial a_\infty^2}{\partial t} + \text{div}\,(\nabla S_\infty\,\frac{a^2}{m}) = 0.$$

Vamos considerar (para simplificar) o caso em que x unidimensional e explicar o sentido da afirmação acima.

Teorema 1.22. *(Van Vleck) Considere $S_\infty(t,t',y,y')$ como definido acima. Se definirmos a^2 de tal forma que para x' e t' fixos temos que para quaisquer x,t*

$$a_\infty^2(t,x) = det\,(\frac{\partial^2 S_\infty(t,y,t',x')}{\partial y \partial y'})|_{(t,x,t',x')},$$

então, a^2 satisfaz a equação de continuidade, ou seja, para qualquer (t,x)

$$\frac{\partial a_\infty^2(t,x)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\frac{\partial S_\infty(t,x,t',y')}{\partial x}\,\frac{a^2(t,x)}{m}) = 0.$$

Demonstração. De fato, note que

$$\frac{\partial a_\infty^2(r,y)}{\partial r}|_{(r=t,x,t',x')} = \frac{\partial(\frac{\partial^2 S_\infty(r,y,t',y')}{\partial y\partial y'})}{\partial r})|_{(r=t,x,t',x')} =$$

$$= \frac{\partial^2(\frac{\partial S_\infty(r,y,t',y')}{\partial r})}{\partial y \partial y'})|_{(r=t,x,t',x')} =$$

$$-\frac{\partial^2[\,\frac{1}{2\,m}\,(\frac{\partial S_\infty(r,y,t',y')}{\partial y})^2 + V(y)]}{\partial y\partial y'})|_{(r=t,x,t',x')} =$$

$$-\frac{\partial}{\partial y}(\frac{1}{m}\,\frac{\partial S_\infty(r,y,t',y')}{\partial y}\,\frac{\partial^2 S_\infty(r,y,t',y')}{\partial y'\partial y})|_{(r=t,x,t',x')} =$$

$$-\frac{1}{m}\frac{\partial}{\partial y}(\frac{\partial S_\infty(r,y,t',y')}{\partial y}\,a^2(r,y))|_{(r=t,x,t',x')}.$$

□

Se considerássemos

$$S_m(t,t',x,x') = \int_t^{t'}[< p(s)\,,\,\frac{d}{ds}x(s) > - H_m(x(s),p(s))\,]ds,$$

obteríamos a relação dada pela equação de continuidade, ou seja, para qualquer (t, x)

$$\frac{\partial a_m^2(t,x)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\,(\frac{\partial S_m(t,x,t',y')}{\partial x}\,\frac{a_m^2(t,x)}{m}) = 0.$$

Note que no caso do oscilador harmonico

$$\frac{\partial^2 S_\infty(x,y,t)}{\partial x\,\partial y} = \frac{-w}{\sin(w\,t)}.$$

Assim, se t for pequeno, mas não nulo, então $\frac{-w}{\sin(w\,t)}$ fica finito.

A seção 2.18 trata do assunto tratado acima de um ponto de vista diferente.

1.12 Fluxo de Probabilidades e Transporte

Considere uma condição inicial dada por um estado ψ_0, assim

$$\int |\psi_0(x)|^2\,dx \;=\; \int |\psi(0,x)|^2 dx = 1.$$

Seja ψ_t o estado no tempo t que resulta da evolução temporal segundo a equação de Schrödinger. Sabemos que

$$\int |\psi(t,x)|^2 dx = 1$$

para todos valores de $t \geq 0$. Sabemos também que para estados estacionários (por exemplo, $\psi^0 = \varphi_n$, o n-ésimo autovalor) a densidade de probabilidade deve ser conservada, já que $|\varphi_n(t,x)|^2 = |e^{-iE_n t/\hbar}\varphi_n(0,x)|^2 = |\varphi_n(0,x)|^2$.

Considere ψ_t, $t \geq 0$, cuja evolução temporal satisfaz a equação de Schrödinger. Pode-se mostrar que se a probabilidade de encontrar a partícula no intervalo $[a, b]$ fixado for denotada por $P_t(a, b)$, então

$$\frac{d\,P_t(a,b)}{d\,t} = \mathbf{j}(a,t) - \mathbf{j}(b,t),$$

onde,

$$\mathbf{j}(x,t) = \frac{i\,\hbar}{2\,m}(\psi_t(x)\,\frac{\partial \overline{\psi_t}(x)}{\partial\,x} - \overline{\psi_t}(x)\frac{\partial \psi_t\,(x)}{\partial\,x}).$$

Desta forma $\mathbf{j}(x,t)$ desempenha o papel do fluxo de probabilidade entrando por b e saindo por a com a variação do tempo, no exato instante t.

Se ψ_t é estacionário, ou seja, $|\psi_t(x)|$ não varia com $t \in \mathbb{R}$, então $\mathbf{j}(x,t)$, para t fixo, independe de x.

Em geral para um estado ψ satisfazendo a equação de Schrödinger teremos que

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t,x)|^2 = \frac{\partial}{\partial t}\overline{\psi(t,x)}\psi(t,x) + \overline{\psi(t,x)}\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,x) =$$

$$= \overline{\left[-\frac{i}{\hbar}(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_x\psi_t + V\psi_t)\right]}\psi + \overline{\psi}\left[-\frac{i}{\hbar}(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_x\psi_t + V\psi_t)\right] =$$

$$= \frac{i}{\hbar}(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_x\bar{\psi}_t + V\bar{\psi}_t)\psi + \overline{\psi}\left[-\frac{i}{\hbar}(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_x\psi_t + V\psi_t)\right] = \frac{i\hbar}{2m}(\bar{\psi}_t\triangle_x\psi_t - \psi_t\triangle_x\bar{\psi}_t) =$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}div(\bar{\psi}_t\nabla\psi_t - \psi_t\nabla\bar{\psi}_t)$$

O valor $\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t,x)|^2$ descreve a tendencia de variação da densidade no ponto x no tempo t.

Sendo assim, no caso unidimensional

$$\frac{d}{dt}\int_a^b |\psi(t,x)|^2\,dx = \int_a^b \frac{d}{dt}\,|\psi(t,x)|^2\,dx =$$

$$\int_a^b \frac{i\hbar}{2m}\frac{d}{dx}(\bar{\psi}_t\frac{d}{dx}\psi_t - \psi_t\frac{d}{dx}\bar{\psi}_t)\,dx = j(a,t) - j(b,t).$$

Definição 1.30. O fluxo (ou corrente) de probabilidade, $\mathbf{j}$ é definida por

$$\mathbf{j}(t,x) = \frac{i\hbar}{2m}(\psi_t\nabla\bar{\psi}_t - \bar{\psi}_t\nabla\psi_t)$$

Portanto o cálculo acima nos dá que

Proposição 1.23. *Se denotamos por $\rho_t(x) = |\psi_t(x)|^2$ temos que a densidade de probabilidade e a corrente de probabilidade satisfazem a seguinte equação*

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + div\,\mathbf{j} = 0$$

Pelo Teorema de Stokes, decorre daí que

$$\frac{d}{dt}\int_K \rho_t(x)\,dx,$$

$K \subset \mathbb{R}^n$, é o fluxo de j através da fronteira de K.

Se a condição inicial ψ_0 é estacionária, então, $\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t,x)|^2 = 0$, para todo x, e, todo $t \geq 0$. Assim, div $\mathbf{j}(t,x) = 0$.

A expressão $\mathbf{j}(t,x) = \frac{i\hbar}{2m}(\bar{\psi}_t \nabla \psi_t - \psi_t \nabla \bar{\psi}_t)$ pode também ser expressa como $\mathbf{j}(t,x) = \frac{1}{m}$ Re $(\overline{\psi}_t \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_t)$= Re $(\overline{\psi}_t \frac{\mathcal{P}}{m} \psi_t)$. Se consideramos que $\mathcal{V} = \frac{\mathcal{P}}{m}$ (velocidade) podemos escrever a equação acima como

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div Re } (\overline{\psi}_t \, \mathcal{V} \, \psi_t) = 0.$$

Esta igualdade é um versão quântica da equação clássica do transporte. Uma analogia: podemos pensar que $\overline{\psi}_t \, \psi_t = |\psi_t|^2$ descreve uma espécie de densidade de massa (que vai evoluir com o tempo) e que o divergente do valor médio de $\mathcal{V}$ descreve a direção de deslocamento infinitesimal desta massa.

Referimos o leitor a seção 5.3.6.2 de [82] para algumas considerações gerais e referencias sobre o modelo da onda piloto de "de Broglie-Bohm".

1.13 O Teorema de Ehrenfest e a dispersão clássica e quântica

Como sabemos, via a equação de Hamilton, o Hamiltoniano,

$$H(x,p) = \frac{|p|^2}{2m} + V(x) = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} + V(x),$$

$x, p \in \mathbb{R}^3$, determina a solução $(x(t), p(t))$ em que $x'(t) = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p(t)}{m}$, $p'(t) = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial V}{\partial x}(x(t))$, e onde $F = -\frac{\partial V}{\partial x}$ é a fôrça que age no sistema.

Para simplificar vamos pensar no caso em que q é unidimensional.

Vamos explicar ao leitor porque, num certo sentido, obtemos o cenário clássico se tomarmos a massa m grande no sistema quântico associado.

Como motivação vamos considerar primeiro no caso clássico um certa distribuição $\rho_t(x,p)$, ao longo do tempo t, obtida a partir de uma certa densidade $\rho_0(x,p)$ (que desempenha o papel da condição inicial no problema probabilístico).

Assim, a probabilidade clássica de encontrar (x, p) no tempo t numa região $A \subset \mathbb{R}^2$ seria

$$\int_A \rho_t(x,p)\, dx\, dp.$$

Mais exatamente, se Φ_t é o fluxo Hamiltoniano (clássico)

$$\int_A \rho_t(x,p)\, dx\, dp = \int_{\Phi_t^{-1}(A)} \rho_0(x,p)\, dx\, dp.$$

De outra forma, se $g(x,p)$ é uma função contínua

$$\int g(x,p)\, \rho_t(x,p)\, dx\, dp = \int g(\Phi_t(x,p))\, \rho_0(x,p)\, dx\, dp.$$

A densidade de probabilidade $\rho_t(x,p)$ evolui sob a ação do fluxo Hamiltoniano, assim,

$$\frac{d}{dt}\rho_t(x,p) = \frac{\partial \rho_t}{\partial x}\, q'(t) + \frac{\partial \rho_t}{\partial p}\, p'(t) = \frac{\partial \rho_t}{\partial x}\, \frac{p(t)}{m} - \frac{\partial \rho_t}{\partial p}\, \frac{\partial V}{\partial x}(q(t)).$$

O valor esperado de posição e momento seria

$$Q(t) = E(x(t)) = \int x\, \rho_t(x,p)\, dx\, dp$$

e

$$P(t) = E(p(t)) = \int p\, \rho_t(x,p)\, dx\, dp.$$

Note que para t fixo $\rho_t(x,p)$ vai a zero quando $(x,p) \to \infty$.

Denotamos por Π_x a função projeção na primeira variável $\Pi_x(x,p) = x$, e, Π_p a função projeção na segunda variável $\Pi_p(x,p) = p$.

Desta forma, obtemos que $Q(t)$ e $P(t)$ satisfazem

$$Q'(t) = \frac{d}{dt}\int q\rho_t(x,p)\, dxdp = \frac{d}{dt}\int \Pi_x(x,p)\rho_t(x,p)\, dxdp =$$

$$\frac{d}{dt}\int \Pi_x(\Phi_t((x,p))\rho_0(x,p)\, dxdp = \int \frac{\partial H}{\partial p}(\Phi_t((x,p))\, \rho_0(x,p)\, dxdp = \frac{P(t)}{m},$$

e,

$$P'(t) = \frac{d}{dt}\int p\rho_t(x,p)\, dxdp = \frac{d}{dt}\int \Pi_p(x,p)\rho_t(x,p)\, dxdp =$$

$$\frac{d}{dt}\int \Pi_p(\Phi_t((x,p))\rho_0(x,p)\,dxdp = -\int \frac{\partial H}{\partial x}(\Phi_t((x,p))\,\rho_0(x,p)\,dxdp =$$

$$\int F(x)\,\rho_t(x,p)\,dx\,dp.$$

Estas duas equações: $\forall t$, $Q'(t) = \frac{P(t)}{m}$, $P'(t) = \int F(x)\,\rho_t(x,p)\,dx\,dp$; descrevem mais uma analogia relacionando o que sucede no mundo clássico e quântico via valor esperado.

Note que, em geral, se $F(t) = F(x(t))$, então $E(F(t)) \neq F(E(x(t)) = F(Q(t))$.

Se fosse verdade (tal não acontece em geral) que

$$F(Q(t)) = m\frac{d}{dt}(Q'(t))) = \frac{d}{dt}P(t),$$

então o valor médio de q no tempo t satisfaria a Lei de Newton associada. Desta forma se $Q(0) = x_0$, e, $P(0) = p_0$, então o valor médio $Q(t)$ acompanharia a evolução determinística $x(t)$, via equação de Hamilton, a partir desta condição inicial (x_0, p_0). A menos que o potencial V seja quadrático isto não vai ocorrer como veremos.

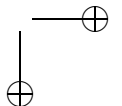
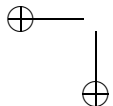
Vamos expandir $\frac{d}{dt}P(t)$ na variável Q em torno de $Q(t)$ para um t fixo. Para isto será necessário expandir $F(x) = -\frac{d}{dx}V(x)$ em torno de $Q(t)$. O desenvolvimento abaixo é para integrais.

Ora,

$$F(x) = F(Q(t)) + \frac{d}{dx}F(Q(t))(x - Q(t)) + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}F(Q(t))(x - Q(t))^2 + ...$$

Assim, para t fixo, como $\int(x - Q(t))\rho_t(x,p)\,dx\,dp = 0$, temos que

$$\frac{d}{dt}P(t) = \int F(x)\,\rho_t(x,p)\,dx\,dp\; =$$

$$F(Q(t)) + \int \frac{d}{dx}F(Q(t))(x - Q(t))\,\rho_t(x,p) +$$

$$\int \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}F(Q(t))(x - Q(t))^2\,\rho_t(x,p) + \int ... =$$

$$F(Q(t)) + \frac{d}{dx}F(Q(t))\int (x - Q(t))\rho_t(x,p) +$$

$$\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}F(Q(t))\int (x - Q(t))^2\,\rho_t(x,p) + \int ... =$$

$$F(Q(t)) + \frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}F(Q(t))\,(\Delta Q(t))^2_{\rho_t} + \int ...$$

Assim, para um T fixo, é necessário que para todo $t \in [0,T]$ valha que

$$\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}F(Q(t))\,(\Delta Q(t))^2_{\rho_t}$$

seja pequeno em módulo em relação a $F(Q(t))$, para que o valor médio $Q(t)$, $t \in [0,T]$, para a condição inicial $\rho_0(x,p)$ (que determina $Q(0) = x_0$, $P(0) = p_0$), acompanhe aproximadamente a evolução determinística $q(t)$, via equação de Hamilton, a partir da condição inicial (x_0, p_0). Para T fixo, $Q(t)$ vai estar em um conjunto limitado (que se pode estimar) e assim, sob condições razoáveis sobre V, temos que $\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}F(Q(t))$ é limitado também. Em particular é necessário que $(\Delta Q(t))^2_{\rho_t}$ seja pequeno para $t = 0$ em relação a $-\frac{1}{2}\frac{d^3}{dx^3}V(x_0)$. Isto tudo depende, é claro, de quem é ρ_0. Desta forma se $\rho_0(x,p)$ fosse **aproximadamente** uma delta Dirac em torno de (x_0, p_0) o que afirmamos acima seria **aproximadamente** atingido.

Em resumo, obtivemos a condição: assumir que $(\Delta Q(t))^2_{\rho_t}$ é menor que o módulo de

$$\frac{\frac{d}{dx}V(x)}{-\frac{1}{2}\frac{d^3}{dx^3}V(x)}$$

para que o descrito acima ocorra.

Por outro lado, se a dispersão de ρ_0 for grande, tal não vai ocorrer. Podemos pensar que o mundo clássico é o mundo quântico, só que no primeiro as dispersões são absurdamente pequenas.

Sendo assim, na análise da evolução temporal de uma densidade na Mecânica Clássica, apenas quando a variância da densidade inicial é pequena, é que temos uma boa compatibilidade determinística-estocástica.

Na Mecânica Quântica o princípio da incerteza, de certa forma, impede a hipótese análoga de se poder assumir algo similar a condição que envolve uma delta Dirac em torno de (x_0, p_0). Sendo assim, para uma análise do problema semi-clássico, vamos considerar um pacote de ondas Gaussiano (ver seção 1.7), e, proceder de forma semelhante ao que foi feito acima (no caso clássico). Para se obter resultados rigorosos no limite semi-clássico devemos proceder da seguinte forma: fixar um tempo T, um Hamiltoniano $H(x,p)$, sua quantização $\mathcal{H} = \mathcal{H}_m$, e, a seguir, analisar propriedades assintóticas das densidades associadas,

quando a massa vai a infinito. No momento o que sabemos mostra foi o que exibimos acima.

Considere uma condição inicial ψ_0 e sua evolução ψ_t segundo a equação de Schrödinger para a quantização $\mathcal{H}$ do Hamiltoniano $H(x,p)$ acima. Vamos considerar um condição inicial (x_0, p_0) para o problema clássico (evolução temporal via a equação de Hamilton).

Anteriormente havíamos obtido as expressões

$$m\,\frac{d}{dt} < \mathcal{X} >_{\psi_t} = < \mathcal{P} >_{\psi_t}, \ \text{ e } \ \frac{d}{dt}\langle \mathcal{P} \rangle_{\psi_t} \;=\; \langle -\frac{\partial V}{\partial x} \rangle_{\psi_t}.$$

Note que não é necessariamente verdade que

$$m\,\frac{d^2}{dt^2} < \mathcal{X} >_{\psi_t} = -\frac{\partial V}{\partial x}(< \mathcal{X} >_{\psi_t}).$$

Seja um Hamiltoniano H com potencial V e o correspondente operador quantizado $\mathbf{H}$. Se ψ_t evolui segundo a equação de Schrödinger para $\mathbf{H}$ temos que a evolução temporal da média da posição espacial é descrita por $< \mathcal{X} >_{\psi_t}$. Ora,

$$m\frac{d^2}{dt^2} < \mathcal{X} >_{\psi_t} = < -\frac{dV}{dx} >_{\psi_t} =$$

$$-\int \frac{dV}{dx}(x)|\psi_t(x)|^2 dx = \int F(x)|\psi_t(x)|^2 dx.$$

Assuma que

$$< \mathcal{X} >_{\psi_0} = E_{\psi_0}(\mathcal{X}) = x_0$$

e

$$< \mathcal{P} >_{\psi_0} = E_{\psi_0}(\mathcal{P}) = p_0.$$

Sabemos que $m\,\frac{d}{dt} < \mathcal{X} >_{\psi_0} = < \mathcal{P} >_{\psi_0} = p_0$.

Se fosse verdade que

$$m\,\frac{d^2}{dt^2} < \mathcal{X} >_{\psi_t} = F(< \mathcal{X} >_{\psi_t})$$

então,$< \mathcal{X} >_{\psi_t}$ iria satisfazer a Lei de Newton com condição inicial x_0 e p_0. Em geral tal não acontece.

Novamente, expandindo $F(x) = -\frac{d}{dx}V(x)$ na variável q em torno de $< \mathcal{X} >_{\psi_t}$ obtemos

$$F(x) = F(< \mathcal{X} >_{\psi_t}) + \frac{d}{dx}F(< \mathcal{X} >_{\psi_t})(x - < \mathcal{X} >_{\psi_t}) +$$

$$\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}F(<\mathcal{X}>_{\psi_t})(x-<\mathcal{X}>_{\psi_t})^2+...$$

Assim, para t fixo, como $\int(x-<\mathcal{X}>_{\psi_t})\,|\psi_t(x)|^2\,dx=0$, temos que

$$m\,\frac{d^2}{dt^2}<\mathcal{X}>_{\psi_t}=\int F(x)\;|\psi_t(x)|^2\,dx=$$

$$F(<\mathcal{X}>_{\psi_t})+\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\,F(<\mathcal{X}>_{\psi_t})\,\int(x-<\mathcal{X}>_{\psi_t})^2\,|\psi_t(x)|^2\,dx+\int...$$

$$F(<\mathcal{X}>_{\psi_t})+\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\,F(<\mathcal{X}>_{\psi_t})\;(\Delta_{\psi_t}\mathcal{X})^2+....$$

Assim, para um T fixo, é necessário que para todo $t\in[0,T]$ valha que

$$\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\,F(<\mathcal{X}>_{\psi_t})\;(\Delta_{\psi_t}\mathcal{X})^2$$

seja pequeno em módulo, em relação a $F(<\mathcal{X}>_{\psi_t})$, para que o valor médio $<\mathcal{X}>_{\psi_t}$, $t\in[0,T]$, para a condição inicial ψ_0 (que determina x_0 e p_0), acompanhe aproximadamente a evolução determinística $q(t)$, via equação de Hamilton, a partir da condição inicial (x_0,p_0). Para T fixo, $<\mathcal{X}>_{\psi_t}$ vai estar em um conjunto limitado (que se pode estimar) e assim, sob condições razoáveis sobre V, temos que $\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}F(<\mathcal{X}>_{\psi_t}))$ é limitado também. Em particular é necessário que $(\Delta_{\psi_t}\mathcal{X})^2$ seja pequeno para $t=0$ em relação ao módulo de $-\frac{1}{2}\frac{d^3}{dx^3}V(x_0)$ para que isto aconteça.

Em resumo, para que estejamos num cenário próximo ao clássico, é necessário que para todo $t\in[0,T]$ o valor de $(\Delta_{\psi_t}\mathcal{X})^2$ seja bem menor que o módulo de

$$\frac{\frac{d}{dx}V(x)}{-\frac{1}{2}\frac{d^3}{dx^3}V(x)}.$$

Desta forma, isto corresponde a uma exigência forte sobre quão pequeno deve ser a dispersão (variância) do estado incial ψ_0 em relação a $\mathcal{X}$.

Existe uma questão mais sutil envolvendo o limite semiclássico num intervalo de tempo $[0,T]$. As constantes que utilizamos na Física são medidas por nossos cientistas num periodo de tempo pequeno em relação a idade do universo. Assim, aquilo que nos parece constante, por exemplo $\hbar$, poderia de fato não ser, se fosse possível fazer medições em intervalos de tempo T maiores. Desta forma, considerar o limite semiclássico sem o

tempo t, ou com o tempo t no problema, poderia fazer alguma dramática diferença. Mas, no momento, não está muito claro a relevância deste ponto numa análise mais rigorosa do assunto.

1.14 Distribuições e Transformada de Fourier

Nesta seção vamos abordar brevemente alguns aspectos da Teoria das Distribuições sem entrar em muitos detalhes técnicos. Uma boa referência no assunto é a seção 3.4 em [83] (ou, [44], [56]).

O conceito de distribuição, ou, função generalizada em $\mathbb{R}$, é uma generalização do conceito de função, e, é *preliminarmente* descrito como um funcional linear contínuo que age no espaço das funções $C_0^\infty(\mathbb{R}) = \{g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, com derivadas de todas as ordens, e tal que existe um intervalo $[a,b]$ tal que g se anula fora de $[a,b]\}$.

Estas funções em $C_0^\infty(\mathbb{R})$ são denominadas de funções teste.

Para falar em continuidade precisamos de algum sentido de **convergencia para uma sequencia de funções testes** $f_n \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, $n \in \mathbb{N}$.

Dizemos que f_n converge a $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ se existe um intervalo $[a,b]$ tal que o suporte de todas f_n e também de f estão contidos em $[a,b]$. Ainda, se pede que todas as derivadas de todas a ordens k convirjam, ou seja, para todo k vale que $\lim_{n\to\infty} \frac{d^k f_n}{d^k} = \frac{d^k f}{d^k}$.

O conjunto $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ é definido de maneira análoga.

Primeiramente, vejamos como uma função continua pode ser vista como distribuição (ou função generalizada): dada $f \in C(\mathbb{R})$ continua limitada, definimos o funcional associado a f por

$$\mathcal{L}_f : C_0^\infty(\mathbb{R}) \to \mathbb{R}$$
$$\mathcal{L}_f(g) = \int_{\mathbb{R}} f(x)g(x)dx.$$

Assim, estamos substituindo o conceito usual de função, que seria uma lei que associa um valor a cada ponto do domínio, por outro, que envolve a sua ação ao ser integrada contra funções teste g em $C_0^\infty(\mathbb{R})$. Vamos ver que para uma certa classe de funções os dois conceitos se correspondem bijetivamente e de forma natural.

Denotamos por T a aplicação que a cada f associa $\mathcal{L}_f$. Observamos que T é uma aplicação injetiva quando consideramos as f contínuas. De

fato, sejam f_1 e f_2 distintas funções continuas. Então existe um intervalo $[a, b]$ no qual $f_1 \neq f_2$, digamos que $f_1(x) > f_2(x)$, para todo $x \in [a, b]$ (ou vice-versa). Assim, tomando g uma função em $C_0^\infty(\mathbb{R})$ (contínua por tanto) não negativa, não identicamente nula, mas nula fora do intervalo $[a, b]$, tem-se que

$$(T(f_1) - T(f_2))(g) = \int_{\mathbb{R}} (f_1(x) - f_2(x))g(x)dx > 0.$$

Portanto T é injetiva.

Como vimos acima ficou definido em $C_0^\infty(\mathbb{R})$ um sentido de convergencia $f_n \to f$.

Dizemos que uma função linear $L : C_0^\infty(\mathbb{R}) \to \mathbb{R}$ é contínua se para toda sequencia convergente de funções teste $f_n \to f$ vale que $\lim_{n\to\infty} L(f_n) \to L(f)$.

Definição 1.31. O conjunto das distribuições, é descrito como

$$\mathcal{G} = \{L : C_0^\infty(\mathbb{R}) \to \mathbb{R} \big| L \text{ é linear e contínuo}\}.$$

Referimos o leitor interessado na rigorosa formalização matemática do assunto para a seção IV parágrafo 5 [76].

Os **espaços de Sobolev** descrevem a formulação matemática precisa para o estudo das funções generalizadas.

Considere a aplicação $\delta_a : C_0^\infty(\mathbb{R}) \to \mathbb{R}, tal que \delta_a(g) = g(a)$. É fácil ver que ela define uma distribuição.

Denominamos tal função generalizada δ_a de delta de Dirac no ponto a.

Pode-se mostrar que não existe uma função f, tal que $T_f = \delta_a$. Portanto a aplicação T não é sobrejetiva. Observe ainda que se existisse tal função, ela deveria valer infinito no ponto a e zero em todos os outros pontos. Fisicamente falando, tal "função" δ_a representa, num certo sentido natural, a distribuição de calor de uma barra de ferro no instante exato em que cai um pingo de solda em um ponto $a \in \mathbb{R}$ desta barra. Portanto, poderia ser uma condição inicial para a equação do calor. As distribuições foram criadas, justamente com o intuito de ampliar o conjunto das funções, permitindo considerar matematicamente situações como a descrita acima. δ_a descreve uma "função" em que não existe dispersão em torno da média a.

Usaremos a notação $\delta_a(dx)$ para denotar a delta Dirac em a agindo na variável x e $\delta_b(dy)$ para denotar a delta Dirac em b agindo na variável y.

Se $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ **tivesse quadrado integravel** a ela podemos associar a distrbuição L_ψ, de tal forma que para uma função teste g obtemos $L_\psi(g) = \int \psi(x) g(x) dx$.

Ainda, para x_0 fixo a função $p \to \psi(p) = e^{\frac{-ip\,x_0}{\hbar}}$ não está em $\mathcal{L}^2(dx)$, mas podemos considerar um funcional linear (distribuição) associado agindo em funções teste g da forma

$$L_\psi(g)(p) \;=\; \int g(p) e^{\frac{-ip\,x_0}{\hbar}}\, d\,p.$$

Desta forma, para x_0 fixo, a distribuição

$$L_{e^{\frac{-i\,p\,x_0}{\hbar}}} = L_{\psi(p)} \tag{1.11}$$

tem um sentido bem definido.

Da mesma forma, para p_0 fixo, a distribuição

$$L_{e^{\frac{-i\,x\,p_0}{\hbar}}} = L_{\psi(x)}, \tag{1.12}$$

onde $\psi(x) = e^{\frac{-i\,x\,p_0}{\hbar}}$ tem um sentido bem definido.

Podemos definir a derivada de uma distribuição, de maneira coerente com o conceito usual de derivada de função. De fato, note que

$$\mathcal{L}_{f'}(g) = \int_{\mathbb{R}} f'(x) g(x) dx = -\int_{\mathbb{R}} f(x) g'(x) dx = -\mathcal{L}_f(g'),$$

o que motiva a seguinte definição de derivada de uma distribuição L. A derivada de L será denotada pela distribuição L'. Assim, para cada $L \in \mathcal{G}$, temos que dizer qual a ação da sua derivada L' em funções teste g. Desta forma é natural dizer que dada uma g teste, então

$$L'(g) = -L(g').$$

Por exemplo, seja a função $f(x)$ tal que $f(x) = 0$, se $x \leq x_0$, e, tem o valor 1 no outro caso, onde $x_0 \in \mathbb{R}$ está fixado. Esta função nao

é diferenciável em $x = x_0$. No sentido de ditribuição sua derivada é a delta Dirac em x_0. De fato, seja uma função teste g de classe C^∞ que se anula fora de um intervalo, digamos $[a, b]$. Vamos denotar por L a função f agindo em funções teste g com distribuição.

Assim, suponha primeiro que $x_0 \in [a, b]$. Então

$$L'(g) = -\int_a^b g'(x)f(x)dx = -\int_{x_0}^b g'(x)dx = -[g(b) - g(x_0)] = g(x_0) = \delta_{x_0}(g).$$

No caso em x_0 não está em $[a, b]$ obtemos o mesmo resultado. Desta forma, a afirmação está justificada.

Para concluir, queremos definir a transformada de Fourier de uma distribuição. Este conceito deve generalizar o anteriormente introduzido para as funções usuais. Referimos o leitor para [56] para uma exposição detalhada no assunto.

Definição 1.32. Dada uma distribuição descrita pelo funcional L, para cada $p \in \mathbb{R}^n$ defina (quando bem definido para todo p)

$$h(p) = L((2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}).$$

Considere agora o funcional L_h, ou seja $L_h(g) = \int g(p)h(p)dp$.

Acima L é uma distribuição que age em funções teste $\varphi(x)$ na variável x. Entretanto, L_h é uma distribuição que age em funções teste $g(p)$.

De maneira informal podemos denotar o h acima como $h(p) = \hat{L}(p)$.

A distribuição L_h, quando bem definida, é a transformada de Fourier da distribuição L.

Como se sabe nem toda função $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ possui transformada de Fourier. Da mesma forma nem toda distribuição possui transformada de Fourier.

A presente "definição" necessita de alguns reparos. De qualquer modo, a definição é consistente com o descrito anteriormente. De fato, **se** $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ **tivesse quadrado integravel**, como vimos, a ela associamos uma distrbuição L_ψ. A transformada de Fourier de ψ é

$$\hat{\psi}(p) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x)dx = L_\psi((2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}) = h(p).$$

A propriedade que afirma que para qualquer dado p a integral acima é finita segue do Teorema de Plancherel que foi apresentado na seção 1.4.

Em resumo, dado $\psi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ **de quadrado integravel** e a distribuição $L = L_{\psi(x)}$, então a transformada de Fourier de tal L seria $L_{\hat{L}(p)} = L_{\hat{\psi}(p)}$.

Considere agora L a distribuição delta Dirac em x_0, denotada $\delta_{x_0}(dx)$. Vamos mostrar ao fim desta seção que neste caso $L(\varphi) = \varphi(x_0)$.

Neste caso a sua transformada de Fourier seria a função

$$p \to \widehat{\delta_{x_0}}(p) = h(p) = \int ((2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ipx}{\hbar}})\, \delta_{x_0}(dx) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ip\,x_0}{\hbar}}.$$

O sentido da expressão acima a direita é descrita pela distribuição (1.11). Dito de outra forma, $(2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ip\,x_0}{\hbar}}$ é a transformada de Fourier no sentido de distribuições de $\delta_{x_0}(dx)$.

Desta forma a descrição da "posição do estado"com menor dispersão, que seria a delta Dirac em x_0 (uma distribuição que nao corresponde a uma função em $\mathcal{L}^2(dx)$), tem como transformada de Fourier uma distribuição associada a uma função (que não está também em $\mathcal{L}^2(dx)$) que seria $p \to 2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ip\,x_0}{\hbar}}$. Uma onda oscilante pura com coeficiente x_0.

Outro exemplo, associado a $\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ip_0\,x}{\hbar}}$ podemos considerar a distribuição (ver (1.12))

$$\varphi \to L_\psi(\varphi)(s) \ = \int \varphi(s) e^{\frac{-i\,s\,p_0}{\hbar}}\, d\,s.$$

Sua transformada de Fourier seria dada por

$$p \to L_\psi((2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ip\,s}{\hbar}}) = \int \ (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ip\,s}{\hbar}}\ e^{\frac{-ip_0\,s}{\hbar}}\, d\,s.$$

Se $p_0 = 0$, ou seja $\psi = 1$, temos

$$p \to L_\psi((2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ip\,s}{\hbar}}) = \int \ (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ip\,s}{\hbar}}\ \ d\,s.$$

Vamos mostrar que a distribuição (funcional linear)

$$f \to \int f(p)\, (\int e^{-\frac{i}{\hbar}\,p\,s} ds\,)\, dp \tag{1.13}$$

é a delta Dirac em $p_0 = 0$, isto é $\delta_0(dx)$.

Isto significa que a transformada de Fourier da distribuição associada a funcão constante igual a 1, isto é

$$\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-i\,0\,x}{\hbar}}$$

é a delta Dirac em $p_0 = 0$.

$\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ip_0\,x}{\hbar}}$

De fato, esta última distribuição satisfaz

$$f(.) \;\to\; \int f(p)\,(\int\; e^{-\frac{i}{\hbar}\,p\,s}\,ds\;)dp = \int f(s)\,(\int\; e^{-\frac{i}{\hbar}\,p\,s}\,ds\;)dp =$$

$$\int (\int\; f(s)\,e^{-\frac{i}{\hbar}\,p\,s}\,ds\;)dp = \int \hat{f}(p)dp = \int e^{\frac{i}{\hbar}\,p\,0}\,\hat{f}(p)dp.$$

onde $\hat{f}$ é a transformada de Fourier de f.

Assim, se f é uma função teste temos que $f \to \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(p)\,e^{\frac{i}{\hbar}\,p\,0}dp$ onde $\hat{f}$ é a transformada de Fourier de f. Lembre que a tranformada de Fourier inversa da transformada de Fourier é a identidade agindo em funções.

Assim temos que

$$f(s) = (\frac{1}{2\,\pi\,\hbar})^{1/2} \int e^{\frac{i}{\hbar}\,p\,s}\hat{f}(p)dp. \tag{1.14}$$

Logo, tomando $s = 0$

$$\int \hat{f}(p)dp \;=\; (2\,\pi\,\hbar)^{1/2} f(0).$$

Resulta então

$$\int f(s)\,ds \int\; e^{-\,\frac{i}{\hbar}\,p\,s}\,dp = f(0).$$

No sentido de distribuição temos que $\int f(s)\;\delta_0(ds) = f(0)$. Assim, mostramos a propriedade enunciada no caso $p_0 = 0$.

Ainda, se $\psi(x) = (2\pi\hbar)^{-1/2} e^{\frac{-ip_0\,x}{\hbar}}$, então a transformada de Fourier no sentido de distribuições de L_ψ é a delta Dirac em p_0, ou seja $\delta_{p_0}(dx)$. Isto está em consonancia com o Princípio da Incerteza.

As figura 1.4 e 1.5 ilustram de certa forma o que estamos descrevendo analiticamente acima.

Agora vamos dar um sentido diferente a afirmação $\int f(s)\, \delta_0(ds) = f(0)$. Vamos descrever a ação da delta Dirac δ_0 via um procedimento limite.

Esse processo de tomar o limite requer um novo olhar sobre a definição de distribuição. Para o bom entendimento necessitamos antes de mais nada de apresentar algumas tecnicalidades bem simples. Uma maneira equivalente a feita acima para essa definição é a seguinte: dizemos que a sequência de funções $\{f_n\} \subset C^\infty(\mathbb{R})$ converge fracamente se para toda função $g \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, existe o limite

$$\lim_{n\to\infty} \int f_n(x) g(x) dx.$$

Uma distribuição L é o conceito matemático associado a uma sequência fracamente convergente de $\{f_n\}$, de modo que faz sentido falar em

$$L(g) := \lim_{n\to\infty} \int f_n(x) g(x) dx$$

Observações:

1. Sequências distintas $\{f_n\}$ podem definir o mesmo funcional linear L. Essas sequências são chamadas sequências equivalentes e definem a mesma distribuição.

2. Uma sequência fracamente convergente pode ou não ser pontualmente convergente, uniformemente convergente, etc.

3. Como na primeira definição de distribuição, fica bem definida a derivada, e isto está coerente com o fato de generalizarmos o conceito de função desta forma. Então, seja $L = L_\phi$ para alguma função usual ϕ. A definição de derivada de uma distribuição é consistente. De fato, comprovamos isto via as expressões

$$\int \phi'(x) g(x) dx := \lim_{n\to\infty} \int f_n'(x) g(x) dx =$$
$$\lim_{n\to\infty} - \int f_n(x) g'(x) dx = - \int \phi(x) g'(x) dx.$$

Pode-se mostrar que essa segunda definição de distribuição via este procedimento é equivalente a primeira. Mas ela ainda não está suficientemente boa para definir a transformada de Fourier de uma distribuição.

Para que possamos fazer isso, será necessário restringir o conjunto no qual as funções f_n podem variar.

É possível dar um sentido geral ao conceito de convergência no espaço das distribuições e isto conduz ao conceito de espaço de Sobolev (ver seção 3.1 em [20]).

Dizemos que uma função f é de Schwartz, se

$$\lim_{x\to\pm\infty} x^n \frac{d^m}{dx^m} f(x) = 0, \ \forall n, m \in \mathbb{N}.$$

Uma distribuição cuja transformada de Fourier está bem definida é uma aplicação obtida como limite fraco de uma sequência de funções de Schwartz. No presente texto não vamos apresentar a formulação completa deste tópico que é bem complexo.

Finalmente, após este preliminares, podemos apresentar uma boa definição de transformada de Fourier para distribuições. Dada uma distribuição ϕ associada a sequência de funções de Schwartz f_n, definimos a transformada de Fourier de ϕ, denotada por $\hat{\phi}$, como a distribuição limite associada a sequência de funções de Schwartz $\hat{f}_n$.
Observa-se que a transformada de Fourier de uma função de Schwartz é de Schwartz e o mesmo ocorre com a inversa da transformada. Além disso, se uma sequência de funções de Schwartz converge fracamente, a sequência de suas transformadas também converge fracamente.

A distribuição δ_{x_0} vai ser obtida via um procedimento limite envolvendo funções f_n.

Como ilustração do que desejamos estabelecer vamos considerar o que seria a transformada de Fourier da distribuição δ_{x_0}. Tomando

$$f_n(x) = \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2(x-x_0)^2},$$

devemos mostrar que f_n converge fracamente a δ_{x_0} no sentido acima, ou seja, que para qualquer g com suporte compacto

$$\lim_{n\to\infty} \int \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2(x-x_0)^2}\, g(x)\, dx \ = g(x_0).$$

Como $\int f_n(x)dx = 1$, temos que isto equivale a

$$\lim_{n\to\infty} \int \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2(x-x_0)^2}\, [g(x) - g(x_0)]\, dx \ = 0.$$

Assim, podemos supor que $g(x_0) = 0$. Por mudança de variável podemos supor que $x_0 = 0$.

Resta assim provar que

$$\lim_{n\to\infty} \int \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2x^2}\, g(x)\, dx = 0$$

para qualquer g com suporte compacto satisfazendo $g(x_0) = 0$.

Como assumimos que $g \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, temos que g' é contínua e limitada. Logo, existe $C > 0$ tal que para qualquer x vale $|g(x)| \leq C\,|x|$. Portanto

$$|\int_{-\infty}^{\infty} \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2x^2}\, g(x)\, dx\,| \;\leq\; \frac{C\,n}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-n^2x^2}\, |x|\, dx \;=$$

$$2\,\frac{C\,n}{\sqrt{\pi}} \int_{0}^{\infty} e^{-n^2x^2}\, |x|\, dx \;=\frac{C}{n\,\sqrt{\pi}}.$$

Assim,

$$\lim_{n\to\infty} |\int_{-\infty}^{\infty} \frac{n}{\sqrt{\pi}} e^{-n^2x^2}\, g(x)\, dx\,| \;=\; 0$$

o que prova o resultado desejado.

Sendo assim, no sentido de distribuições é lícito dizer que a transformada de Fourier da delta Dirac em x_0 é a função $p \to \frac{1}{(2\,\pi\hbar)^{1/2}}\, e^{-\frac{i\,p\,x_0}{\hbar}}$. Esta função não está em $\mathcal{L}^2(dp)$.

Capítulo 2

Tópicos Selecionados de Mecânica Quântica

2.1 Teoria Espectral

A sequência de resultados que vamos apresentar nesta seção seguem em sua maior parte as linhas descritas em [156] [305]. Alguns resultados de Análise Funcional que utilizaremos são provados em [282], [182], [321], [305] [17] [83], [157] e [44].

O Teorema Espectral para um operador autoadjunto não limitado permite entender com mais profundidade e de maneira unificada uma série de resultados e propriedades da Mecânica Quântica (entre eles alguns postulados anteriormente apresentados). Ele vai generalizar o Teorema Espetral para operadores autoadjuntos em dimensão finita.

Queremos estudar (entre outras coisas) o espectro da soluções da equação de Schrödinger com condição inicial

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \mathbf{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(x)\,\psi$$

$$\psi_t|_{t=0} = \psi_0.$$

Desejamos saber, por exemplo, sob quais hipóteses sobre V existirá um conjunto ortonormal enumerável completo para $\mathbf{H}$.

Primeiro vamos relembrar o conceito de espectro de um operador.

Definição 2.1. O *resolvente* de um operador A (eventualmente não limitado e definido apenas num domínio denso) agindo sobre um espaço

de Hilbert $\mathcal{H}$ é o subconjunto dos números complexos

$$\rho\,(A) = \{\, \lambda \in \mathbb{C} \,|\, (A - \lambda I) \quad \text{é densamente definido em } \mathcal{H}$$

$$\text{e ainda}\,(A - \lambda I)\,\text{possui inversa limitada}\,.\,\}$$

Assim, $(A - \lambda I)^{-1}$ se extende a $\mathcal{H}$ como operador limitado.
O *espectro* $\sigma(A)$ é definido como $\sigma(A) = \mathbb{C} - \rho(A)$.

Os autovalores fazem parte do espectro. Sabemos que se A for um operador auto-adjunto então os autovalores são reais. Vamos mostrar mais tarde que se A for um operador auto-adjunto então o espectro também está contido na reta real.

Em [80] é analizado o espectro de operadores de Schrödinger discretizados quando o potencial é dinamicamente definido. Não vamos tratar deste caso aqui.

Lembre que dado $h : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, a associada integral de Riemann-Stieltjes de uma função $f(\lambda)$, $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, é denotada por $\int f(\lambda) d\, h(\lambda)$ (ver chapter 9 in [28], ou III seção 8 em [171], [27] ou [225]).

Vamos descrever brevemente o que é uma integral de Riemman-Stieltjes. Para simplificar iremos nos referir a terminologia "integral de Stieltjes". Seja $h : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ crescente e que seja continua a direita em qualquer ponto, isto é, para todo $c \in \mathbb{R}$

$$h(c) = \lim_{\epsilon \to 0^+} g(c + \epsilon).$$

Para cada intervalo $[a, b]$ da reta defina $\mu(\,[a, b]\,) = h(b) - h(a)$. Fica assim definida uma medida finitamente aditiva μ sobre intervalos (que pode ser estendida a sigma algebra de Borel como descrito em [28]).

Desta forma, pode se obter para uma classe grande de funções f, o valor $\int f(\lambda)\, d\, h(\lambda)$ (que podemos também expressar de maneira informal como $\int f(\lambda)\, d\mu(\lambda)$).

No caso de função contínua limitada, o procedimento de integração de uma função f pode ser aquele ao estilo Riemman (fazendo primeiro uma partição da reta em pequenos intervalos, escolhendo um ponto em cada intervalo, avaliando f nele, fazendo o diametro da partição ir a zero, etc...). Para a definição exata recomendamos o leitor para capítulo IV seção 2 em [225].

Ou seja, se f for uma função continua, então

$$\int f(\lambda)dh(\lambda) \sim \sum_{j=0}^{k} f(x_k)\mu(a_k,b_k) = \sum_{j=0}^{k} f(x_k)\,[\,h(b_k)-h(a_k)\,],$$

onde $x_k \in [a_k, b_k)$, e todas as distancias $b_k - a_k$ são arbitrariamente pequenas.

Esta integração não é feita ao estilo Lebesgue. No caso geral, a diferença de tais procedimentos aparecem, por exemplo, em [122].

Sendo assim, se f é uma função não negativa, então a integral é um número não negativo.

Se $h(x) = x$ obtemos a integral usual de Riemann $\int f(\lambda)\,d\,\lambda$.

Dizemos que a "medida"μ esta associada a integral de Stieltjes de h.

No caso geral, as descontinuidades de h (monótona) vão representar átomos para μ (pontos com medida positiva). Por exemplo, suponha que h seja tal que $h(x) = 0$, se $x \leq x_0$, e, $h(x) = 3$, no outro caso.

Fixado um intervalo $[a, b]$, ou ele contém x_0, ou não. Considere a μ associada a tal h. Assim, $\mu[a, b]$ sera nula se x_0 não está em $[a, b]$. Se $x_0 \in (a, b)$, então $\mu[a, b] = 3$,

Seja uma f contínua. Se consideramos uma partição da reta da forma C_j^k, $j = 0, 1, ..., k+1$, k par, e supondo, sem perda de generalidade, que $x_0 \in C_{k/2}^k$, onde

$$C_0^k = (-\infty, a_0], C_1^k = (a_0, a_1], C_2^k = (a_1, a_2], ..., C_k^k = (a_k, a_{k+1}], C_{k+1}^k = (a_{k+1}, \infty),$$

temos que

$$\int f(x)dh(x) = \sum_{j=0}^{k+1} \int_{C_j^k} f(x)dh(x) = \int_{C_{k/2}^k} f(x)dh(x).$$

Este procedimento vale sempre para partições gerais que podemos tomar de tal forma que o comprimento dos intervalos (sem ser os das pontas) é arbitrariamente pequen0 (mas sempre assumindo que $x_0 \in C_{k/2}^k$).

Se k for grande e o comprimento de $C_{k/2}$ for pequeno temos que

$$\int f(x)\,d\mu(x) = \int f(x)dh(x) \sim 3f(x_0).$$

Assim, esta integral de Stieljes correponde a integrar a função f em relação a medida (distribuição) $d\mu = 3\,\delta_{x_0}$.

Pode se mostrar, da mesma forma, que se h for dada da seguinte maneira: $h(x) = 0$, se $x \leq 5$, $h(x) = 3$, se $5 < x \leq 19$, e, $h(x) = 10$, se $19 < x$, então

$$\int f(x)dh(x) = 3f(5) + \,7\,f(19) = \int f(x)\,d\mu(x),$$

onde a μ associada é $(3\delta_5 + 7\,\delta_{19})$.

A partir do que foi dito acima é fácil encontrar outras h que determinam μ da forma $\mu = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \delta_{x_j}$. Neste caso, $\int f(x)dh(x) = \int f(x)d\mu(x) = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j f(x_j)$.

É possível considerar uma definição mais geral que contempla funções h não necessariamente crescentes (ver III seção 9 em [182]). Neste caso, a identificação com uma medida μ, como acima, não ocorre.

Podemos também definir, sob certas hipóteses, para uma $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ e $g : \mathbb{R} \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$, que toma valores em operadores autoadjuntos limitados positivos (são na verdade projeções), a integral $\int f(\lambda)dg(\lambda)$ (que resulta ser um operador). Uma demonstração deste resultado aparece em [63] seção 2.3.

Apresentamos a prova deste resultado, ou seja a existência de um operador B que é igual a $\int f(\lambda)dg(\lambda)$ no escólio ao fim da seção 2.4. Assumiremos lá certa regularidade (continuidade) da função a ser integrada. Note que $B = \int f(\lambda)dg(\lambda)$ pode não ser um operador limitado se f não for contínua.

Em termos mais simples o sentido de tal expressão $B = \int f(\lambda)dg(\lambda)$ (ver seção 4.4 em [198], seção 39 em [165], [76], [1]) resulta na seguinte propriedade: para ϕ em $\mathcal{H}$, defina $g_{\phi,\phi}(\lambda) =< \phi, g(\lambda)(\phi) > \in \mathbb{R}$. Pode-se mostrar que $\lambda \to g_{\phi,\phi}(\lambda)$ é uma função real de variável real (crescente).

Estamos variando o operador como função de λ (usando a família $g(\lambda) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$) e calculando um produto interno usando a ϕ fixa.

Ou seja, o $h(\lambda)$ anterior usada na integral de Stieldges agora será $g_{\phi,\phi}(\lambda)$.

Fixada a família $g : \mathbb{R} \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$, dizer que

$$B\, := \int f(\lambda)dg(\lambda) \in \mathcal{L}(\mathcal{H}),$$

para uma determinada fixa $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, significa afirmar que para todo ϕ, a integral de Stieljes (de f e $h = g_{\phi,\phi}$) está bem definida e vale

$$< \phi, B(\phi) >= \int f(\lambda)\, d\, g_{\phi,\phi}(\lambda).$$

Observe que a integral do lado direito é uma simples integral de Stieljes na reta.

Fixada a f, onde $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, e a função $\lambda \to g(\lambda) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ a B fica definida de maneira única.

Fixada a função $\lambda \to g(\lambda) \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ note que cada f produz um B diferente.

De forma mais precisa: dado λ associe para ϕ e ψ o valor complexo $g_{\phi,\psi}(\lambda) =< \phi, g(\lambda)(\psi) >$, e então B seria o operador tal que

$$< \phi, B(\psi) >= \int f(\lambda)\, d\, g_{\phi,\psi}(\lambda).$$

Desta forma fica definido univocamente o operador B.

Um operador E é dito uma projeção ortogonal se ele é autoadjunto, limitado, e satisfaz $E^2 = E$. Note que $|E| \leq 1$.

Suponha agora que para o operador autoadjunto A, definido num espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, vale o seguinte: existem autovetores ψ_n, $n \in \mathbb{N}$, de multiplicidade finita, com autovalores $\lambda_n \in \mathbb{R}$, que definem um conjunto ortonormal enumerável completo. Em geral sempre se ordena os autovalores em ordem crescente

$$\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_n \leq ...$$

Estamos supondo acima que exista um menor autovalor.

Para cada $\lambda \in \mathbb{R}$, defina o espaço fechado F_λ que é o gerado em $\mathcal{H}$ pelos autovetores $\{\psi_0, \psi_1, ..., \psi_n\}$ tal que $\lambda_n \leq \lambda$. Vamos denotar por $E(\lambda)$ o operador projeção P_{F_λ}. Desta forma, $E(\lambda) = 0$, para $\lambda < \lambda_0$, e, $\lim_{\lambda \to \infty} E(\lambda) = I$.

Note que se, $\lambda_1 < \lambda_2$, então, $E(\lambda_1)E(\lambda_2) = E(\lambda_1)$. Ainda, se o intervalo $[\alpha, \beta]$ não contém autovalores então $E(\alpha) = E(\beta)$.

Observe que se $\lambda_1 < \lambda_2$, então $E(\lambda_2) - E(\lambda_1)$ é um operador positivo.

Sendo assim, considerando fixada uma ϕ, e tomando $g_{\phi,\phi}(\lambda) =< \phi, E(\lambda)(\phi) >$, concluímos que esta função $g_{\phi,\phi}(\lambda)$ é não decrescente em λ.

Para ϕ e ψ fixados vamos considerar abaixo a integral de Stieltjes onde

$$h(\lambda) =< \phi, E(\lambda)(\psi) > .$$

Note que estamos considerando uma h mais geral do que na nossa discussão anterior onde apenas h tomando valores reais era permitida. Se $\phi = \psi$ então estaríamos restritos ao caso que anteriormente discutimos pois tal $h(\lambda)$ seria monótona não descrescente.

O leitor pode considerar o que descrevemos abaixo como uma discussão de caráter heurístico. No caso de ficar incomodado com isto, pode supor que $\phi = \psi$, e assim tudo estará de acordo com a discussão formal rigorosa que fizemos antes.

Desta forma se o intervalo $(\alpha, \beta]$ contém apenas os autovalores λ_3, λ_4, e $\phi = \sum_n a_n \psi_n$, $\psi = \sum_n b_n \psi_n$, temos que

$$< \phi, E(\beta)(\psi) > - < \phi, E(\alpha)(\psi) >= \int_\alpha^\beta d\, h(\lambda) = \, a_3 \overline{b}_3 \, + \, a_4 \overline{b}_4.$$

De fato,

$$\int_\alpha^\beta d \, < \phi, E(\lambda)(\psi) >=$$

$$\int < \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n \, , \, \sum_{n=1}^{4} b_n \psi_n \, > \, dx - \int < \sum_{n=1}^{\infty} a_n \psi_n \, , \, \sum_{n=1}^{2} b_n \psi_n \, > \, dx =$$

$$\int < \sum_{n=3}^{4} a_n \psi_n \, , \, b_n \psi_n \, > \, dx = \, a_3 \overline{b}_3 \, + \, a_4 \overline{b}_4.$$

Ainda, observe que

$$\int_\alpha^\beta < \phi, E(\lambda)(\phi) >= |a_3|^2 + |a_4|^2.$$

De forma sintética, para ϕ e ψ fixadas como acima, a integral de Stieldges da h pode ser expressa como a medida μ (definida na reta real)

$$\mu = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \, \overline{b}_n \;\; \delta_{\lambda_n},$$

onde δ_{λ_n} representa a delta Dirac na reta no ponto λ_n.

Note que μ é uma medida tomando valores complexos (mais detalhes em [299]).

Tomando o caso particular $\phi = \psi = \sum_n a_n \psi_n$ obtemos para tal $h = g_{\phi,\phi}$ a medida real

$$\mu = \sum_{n=1}^{\infty} |\, a_n \,|^2 \;\, \delta_{\lambda_n}.$$

Note que tal μ depende de ϕ e de A.

Observe que

$$\int \lambda \; \mu(\lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} |\, a_n \,|^2 \lambda_n.$$

Da mesma forma, dado $f(\lambda)$

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(\lambda)\, d\, h(\lambda) = \int_{\alpha}^{\beta} f(\lambda)\, d\, g_{\phi,\psi}\,(\lambda) = f(\lambda_3)\, a_3 \overline{b_3} \, + f(\lambda_4)\, a_4 \overline{b_4},$$

se os únicos autovalores de A entre α e β são λ_3 e λ_4

Afirmamos que A pode ser escrito como

$$A \;=\; \sum_n \lambda_n \, P_{\psi_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, dE(\lambda).$$

Para mostrar tal fato, primeiro observe que se $\phi = \sum_n a_n \psi_n$, $\psi = \sum_n b_n \psi_n$, onde ψ_n, $n \in \mathbb{N}$ é conjunto ortonormal completo, então

$$< \phi, A(\psi) > = < \sum_n a_n \psi_n, \; A(\sum_m b_m \psi_m) \; > =$$

$$< \sum_n a_n \psi_n, \; \sum_m \lambda_m \, b_m \psi_m) \; > = \sum_n \; \lambda_n a_n \, \overline{b}_n \; = \int \lambda \, d\mu(\lambda) =$$

$$< \; \phi, \; (\int_{-\infty}^{\infty} \lambda \, dE(\lambda) \,) \, (\psi) \; > .$$

Em resumo, para qualquer ϕ, ψ

$$< \phi, A(\psi) > = \int \lambda \;\; d \; < \phi, E(\lambda)(\psi) > = < \phi, \; (\int \lambda \;\; d\, E(\lambda) \,) \; (\psi) \; > .$$

Ou seja, para cada ϕ, ψ consideramos acima a integral de Stiledjes para

$$h(\lambda) = h_{\phi,\psi}(\lambda) =< \phi, E(\lambda)(\psi) > .$$

Note que

$$A^2 = \sum_n (\lambda_n)^2 \, P_{\psi_n},$$

e assim

$$< \phi, A^2(\psi) >=< \sum_n a_n \psi_n, \, A^2(\sum_m b_m \psi_m) \ >=$$

$$< \sum_n a_n \psi_n, \, \sum_m \lambda_m^2 \, b_m \psi_m) \ >= \sum_n \ \lambda_n^2 \, a_n \, \overline{b}_n \ = \int \lambda^2 \, d\mu.$$

Mais geralmente, para qualquer k

$$A^k = \sum_n (\lambda_n)^k \, P_{\psi_n} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^k \, dE(\lambda).$$

Ora, para qualquer polinômio $f(\lambda)$, temos que

$$f(A) = \sum_n f(\lambda_n) \, P_{\psi_n}.$$

Portanto,

$$f(A) = \int f(\lambda) \, d \, E(\lambda).$$

Note então que

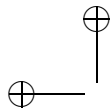
$$e^{-i\,A} = \sum_n e^{-i\,\lambda_n} \ P_{\psi_n} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\,\lambda} \, dE(\lambda).$$

Para um $E \in \mathbb{R}$ fixo no resolvente de A, expressões da forma

$$(A - E\,I)^{-1} \ = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\lambda - E} \, dE(\lambda),$$

ou

$$(\phi, \, (A - E\,I)^{-1} \, \psi >= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\lambda - E} \, d\mu_{\phi,\psi}(\lambda),$$

onde $\mu_{\phi,\psi}(\lambda) =< \phi, E(\lambda)\psi >= h(\lambda)$ aparecem na literatura. A medida $\mu_{\phi,\psi}$ definida na reta real algumas vezes é chamada de medida espectral associada a A e ao par ϕ, ψ.

Desejamos generalizar tais tipos de resultado para um operador autoadjunto não limitado qualquer. Este é o objetivo do próximo teorema. Ele é fundamental na teoria e uma prova do mesmo pode ser encontrada em [287] (seção 5.3), [198] (seção 4.4 e 9.9), [1] (seção 63, 66 e 69), [345] ou [76]. Observamos que o resultado abaixo assume apenas que o operador seja autoadjunto num espaço de Hilbert. Assim, ele pode ser não limitado e pode ainda ser definido apenas num domínio denso.

Note que existem restrições (ver item 6) do próximo teorema) sobre as possíveis funções f que se pode considerar na expressão $f(A) = \int f(\lambda)\, d\, E(\lambda)$.

Observe que $E(\lambda)$ ($g_{\phi,\phi}$ ou $h_{\phi,\phi}$) é definido a partir do espectro de um operador autoadjunto não limitado A definido densamente em $\mathcal{H}$. O procedimento geral que iremos utilizar na definição de $E(\lambda)$ envolve considerar operadores projeção P_λ (como caso particular os P_{F_λ} acima), indexados por $\lambda \in \mathbb{R}$, que projetam numa sequencia crecente de subespacos vetoriais S_λ (os F_λ acima), e que contem funções que estão associados a parte do espectro que tem valores menores que λ. Na sua maior generalidade isto ficará mais claramente descrito em breve. O anteriormente apresentado dá um idéia preliminar do que se vai considerar no próximo teorema.

Escólio Um ponto fundamental a ser destacado é que uma medida de Stieldjes é obtida a partir de uma função crescente. Vamos considerar uma família de projeções $g(\lambda)$ sobre subespaço fechados $S_\lambda \subset \mathcal{H}$.

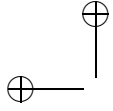
Lembre que $g_{\phi,\phi}(\lambda) =< \phi, g(\lambda)(\phi) > \in \mathbb{R}$.

Dizemos que $g_{\phi,\phi}$ é crescente se $\lambda_1 \leq \lambda_2$ implica $S_{\lambda_1} \subset S_{\lambda_2}$.

Observe que dados E_1 e E_2 que são respectivamente projeções ortogonais sobre S_1 e S_2, então

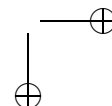
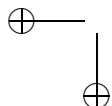
$$< \phi, E_1(\phi) > \geq < \phi, E_2(\phi) >,$$

para todo $\phi \in \mathcal{H}$, se e somente se, $S_2 \subset S_1$.

De fato, note que se $\phi \in S_2$, então

$$< \phi, E_1(\phi) > \ \geq \ < \phi, E_2(\phi) > = < \phi, \phi > \ \geq \ < \phi, E_1(\phi) > .$$

Logo, $< \phi, E_1(\phi) > =< \phi, \phi >$, o que implica que $\phi \in S_1$.

Ainda, por outro lado,

$$< \phi, E_1(\phi) > \ = \ < E_1(\phi), E_1(\phi) > \ \geq \ < E_2\, E_1(\phi)\,), E_2(\, E_1(\phi))\,) >=$$

$$< E_2(\phi), E_2(\phi) > \, = \, < \phi, E_2(\phi) > .$$

Observe ainda que se $E_2\, E_1 = E_1$, então $S_2 \subset S_1$. De fato, isto segue do exposto acima pois: dado $\phi \in \mathcal{H}$, teremos então

$$< \phi, E_2(\phi) > = < \phi, E_2\, E_1(\phi) > = < E_2(\phi), E_2\, E_1(\phi) > \leq \, < \phi, E_1(\phi) > .$$

Desta forma $S_2 \subset S_1$

Com é usual, dado $C \subset \mathbb{R}$, I_C denota a função indicador de C.

Uma excelente exposição em portugues do resultado abaixo aparece em [336] seção 4.

Em [282] o leitor pode encontrar um detalhada exposição da prova do Teorema Espectral no contexto da Mecânica Quântica.

Teorema 2.1. *Teorema Espectral para operadores autadjuntos não limitados- Seja $A : D(A) \subset \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ autoadjunto, onde $\mathcal{H}$ é um espaço de Hilbert.*

Então existe uma única família de projeções ortogonais $E(\lambda)$, $E : \mathbb{R} \to \mathcal{B}(\mathcal{H})$, indexadas por uma parâmetro $\lambda \in \mathbb{R}$ tal que:

1) Se $\lambda_1 < \lambda_2$, então $E(\lambda_1)E(\lambda_2) = E(\lambda_1)$.

2) para qualquer ψ e λ fixos, $\lim_{\epsilon \to 0} E(\lambda + \epsilon)(\psi) \to E(\lambda)(\psi)$ (na norma do Espaço de Hilbert).

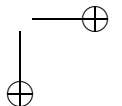
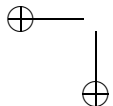
3) Para cada ψ, temos que $\lim_{\lambda \to -\infty} E(\lambda)(\psi) = 0$ e $\lim_{\lambda \to \infty} E(\lambda)(\psi) = \psi$.

4) $\psi \in D(A)$, se e só se, $\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2\, d|E(\lambda)(\psi)|^2 < \infty$.

5) para $\psi \in D(A)$, e, ϕ qualquer, vale

$$< A(\psi), \phi > = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda\, d(< \, E(\lambda)(\psi), \phi > = \int \lambda\, d \, < \, E(\lambda)(\psi), \phi \, > .$$

6) Seja $f(\lambda)$ mensurável tomando valores complexos $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, então o operador

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)\, dE(\lambda),$$

está definido no domínio $D(f(A))$ *que é constituído pelas funções* ψ *tais que*

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(\lambda)|^2 \, d|E(\lambda)(\psi)|^2 < \infty.$$

É natural definir

$$f(A) := \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) \, dE(\lambda).$$

A medida na reta real $\mu_{\psi,\phi}$ *obtida como integral de Stielges para* $h(\lambda) =< E(\lambda)(\psi), \phi >$ *é denominada de medida espectral para* A *e o par* ψ, ϕ *e desempenha papel fundamental na teoria. Assim, para* f *que seja* $\mu_{\psi,\phi}$ *integrável temos*

$$< f(A)(\psi), \phi >= \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) \, d\mu_{\psi,\phi}(\lambda).$$

7) Dadas as funções $f(\lambda)$, $g(\lambda)$, *mensuráveis (como acima) tomando valores complexos vale para qualquer* $\psi \in D(f(A))$, $\phi \in D(g(A))$

$$< f(A)(\psi), g(A)(\phi) >= \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) \, \overline{g(\lambda)} \, d < E(\lambda)(\psi), \phi > .$$

8) $f(A)^* = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{f(\lambda)} \, dE(\lambda)$. *Assim, se* f *toma apenas valores reais então* $f(A)$ *é autoadjunto.*

9) Para todo λ, *o operador*

$$E(\lambda) = \int_{-\infty}^{\lambda} dE(\lambda).$$

10) Dados $\psi \in D(h(A))$, *e,* f_k, $k \in \mathbb{N}$, *tal que para todo* λ *vale* $f_k(\lambda) \leq h(\lambda)$, *se para todo* λ *vale* $f_k(\lambda) \to f(\lambda)$, *então,* $f_k(A)(\psi) \to f(A)(\psi)$, *quando* $k \to \infty$.

11) se $h(\lambda) = f(\lambda)g(\lambda)$ *então* $h(A)$ *é uma extensão de* $f(A) \circ g(A)$. *Decorre daí que se* $f(\lambda) = c_0 + c_1\lambda + ... + c_m\lambda^m$ *é um polinômio, então* $f(A)$ *é uma extensão de*

$$c_0 \, I + c_1 \, A + ... + c_m \, A^m.$$

O conjunto de operadores $E(\lambda)$ *é denominado de família espectral associada a* A *ou resolução da identidade para* A.

12) se $E^{\mathcal{X}}(\lambda)$, $\lambda \in \mathbb{R}$, é a família espectral do operador $\mathcal{X}$, agindo em $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, então para qualquer intervalo $[a,b]$, e, qualquer $\psi \in \mathcal{H}$ e x, temos

$$[\int_a^b dE(\lambda)^{\mathcal{X}}\,(\psi)](x) = I_{[a,b]}(x)\,\psi(x).$$

Assim,

$$<\,[\int_a^b dE(\lambda)^{\mathcal{X}}\,(\psi)],\, \psi\, >= \int_a^b |\psi(x)|^2\,dx.$$

Se $f(\lambda) = I_{[a,b]}(\lambda)$, então $f(\mathcal{X})$ é a multiplicação por $I_{[a,b]}(x)$.

A expressão

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda\, dE(\lambda),$$

que segue do item 6) acima, é conhecida como a decomposição espectral do operador autoadjunto A.

Quando desejamos nos referir a resolução da indentidade de um certo operador A fixado é usual utilizar a expressão $E^A(\lambda), \lambda \in \mathbb{R}$.

Exemplo 2.1. A resolução da identidade para o operador $\mathcal{X}$ é dada pela família de projeções $E(\lambda)(\varphi) = E^{\mathcal{X}}(\lambda)(\varphi) = I_{(-\infty,\lambda)}\;\varphi$ (exemplo 2 seção 39 em [165]). Isto segue do fato que para todo x vale $\mathcal{X}(\psi)\,(x) = \int \lambda d\,E^{\mathcal{X}}(\lambda)(\psi) = x\psi(x)$. Sendo assim, usando o item 10 acima, dada uma função qualquer integrável f (não necessariamente analítica) temos que $f(\mathcal{X})(\psi)\,(x) = \int f(\lambda) d\,E^{\mathcal{X}}(\lambda)(\psi) = f(x)\psi(x)$. O item 12 acima é um caso particular desta afirmação. Desta forma,

$$< g(\mathcal{X})(\psi), \psi >=< g\psi, \psi > .$$

Este exemplo, decreve portanto, em termos matemáticos precisos, a associação formulada pelo Postulado 3 para funções da forma $g(x)$.

Exemplo 2.2. A resolução da identidade para o operador $\psi \to i\,\frac{d\,\psi}{dx}$ é tal que a família de projeções $E^{\mathcal{P}}(\lambda)$ satisfaz (exemplo 3 seção 39 em [165]) para todo $\mu < \nu$ e ψ:

$$(E^{\mathcal{P}}(\nu) - E^{\mathcal{P}}(\mu))(\psi)(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\nu\, i\,(\eta - x)} - e^{\mu\, i\,(\eta - x)}}{i\,(\eta\, -\, x)}\,\psi(\eta)\,d\eta.$$

Exemplo 2.3. A resolução da identidade para o operador $u \to \frac{d^2}{dx^2}(u)$ é dada por:

$u \to [E(\lambda)(u)](x) = u(x) - \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin(\sqrt{-\lambda}\,(s-x))}{s-x} u(s)\, ds, \quad$ se $\lambda < 0$,
$u \to [E(\lambda)(u)](x) = u(x), \quad$ se $\lambda \geq 0$,
conforme 6.3 em [252].

Suponha que $E^A(\lambda) = E(\lambda)$, $\lambda \in \mathbb{R}$, seja a decomposição espectral de A.

Se E é uma projeção ortogonal denotamos $E^\perp = I - E$.

Assim:

1) se $r > 0$, então $E^{r\,A}(\lambda) = E^A(\lambda/r)$,
2) $E^{-A}(\lambda) = E^A(-\lambda)^\perp = I - E^A(-\lambda)$.

Antes de apresentar ao leitor algumas consequências do Teorema Espectral gostaríamos de comentar a sua relação com a ação de medir um observável A para uma partícula que se encontra num estado ψ. Para ψ fixo, a expressão $d < E(\lambda)(\psi), \psi >$ define uma medida real de Stieltjes na variável λ sobre a reta real.

POSTULADO 8. *Fixado um estado ψ, a probabilidade de que a medição do observável A esteja no intervalo $[a, b]$, é dada por*

$$\int_a^b d < E(\lambda)(\psi), \psi > = \; < (\, E(b) - E(a)\,)(\psi), \psi > .$$

Ou seja, se repetirmos uma medição de A, num total de n vezes (n grande), para uma partícula que se encontra no estado ψ, então, o número de vezes que esta medição se encontra em $[a, b]$, dividido por n, é aproximadamente,

$$\int_a^b d < E(\lambda)(\psi), \psi > .$$

O presente postulado generaliza alguns anteriores. Note que ele contempla o caso de espectro contínuo.

Vamos mostrar no Teorema 2.13 que dado um observável A então apenas valores do espectro de A podem ser atingidos como resultado de uma medição de A num estado qualquer ψ.

Suponha que $A = \sum_n \lambda_n P_{\psi_n}$ e existe apenas um autovalor λ_3 em $[a,b]$, então se $\psi = \sum_n a_n \psi_n$, então

$$\int_a^b d < E(\lambda)(\psi), \psi >= |a_3|^2.$$

Ainda,

$$\int_a^b \lambda \; d < E(\lambda)(\psi), \psi >= |a_3|^2 \, \lambda_3.$$

Escólio Note que o postulado 8 cuja formulação se baseia no teorema espectral implica os postulados 1 e 7 (pelo menos em dimensão 1).

De fato, para o caso do postulado 1 tome $A = \mathcal{X}$. Assim a probabilidade de que no estado ψ a localização da partícula esteja no intervalo $[a,b]$ é dada pelo postulado 8 por

$$< \int_a^b d\, E^{\mathcal{X}}(\lambda)(\psi), \psi >=< I_{[a,b]}\, \psi, \psi >= \int_a^b |\psi(x)|^2 \, dx.$$

Isto é o que afirma o postulado 1.

Vamos apenas indicar os passos para se obter o Postulado 7 a partir do 8. Tome $A = \mathcal{P}$ e assim no estado ψ a probabilidade do momento estar no intervalo $[a,b]$ é dada por

$$< \int_a^b d\, E^{\mathcal{P}}(\lambda)(\psi), \psi >=< [\, E^{\mathcal{P}}(b) - E^{\mathcal{P}}(a)\,]\, \psi, \psi >=$$
$$< \mathcal{F}\,([\, E^{\mathcal{P}}(b) - E^{\mathcal{P}}(a)\,])\, \psi, \mathcal{F}\,(\psi)\; >,$$

onde $\mathcal{F}$ é a transformada de Fourier.

Ora,

$$\mathcal{F}\,([\, E^{\mathcal{P}}(b) - E^{\mathcal{P}}(a)\,])\,(\psi)\,(p) =$$
$$\frac{(2\,\pi\hbar)^{-1/2}}{2\,\pi} \int \psi(y) e^{-\frac{i\,py}{\hbar}}\, dy \int e^{-\frac{i\,p}{\hbar}(x-y)}\, \frac{e^{\frac{-i\,a}{\hbar}(x-y)} - e^{\frac{-i\,b}{\hbar}(x-y)}}{i\,(y-x)}\, dx.$$

Pode-se mostrar (ver [53]) que

$$I_{[a,b]}(p) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\,\pi}}\, \mathcal{F}(\, \frac{e^{\frac{i\,b}{\hbar}x} - e^{\frac{i\,a}{\hbar}x}}{i\,x}\,)\,(p).$$

Sendo assim,

$$\mathcal{F}\,([\, E^{\mathcal{P}}(b) - E^{\mathcal{P}}(a)\,])\,(\psi)\,(p) =$$

$$(2\,\pi\hbar)^{-1/2}\, I_{[a,b]}(p)\, \int e^{\frac{-i\,p}{\hbar} y} \psi(y) dy = I_{[a,b]}(p)\, \hat{\psi}(p).$$

Desta forma,

$$< \int_a^b d\, E^{\mathcal{P}}(\lambda)(\psi), \psi > = < I_{[a,b]}(p)\, \hat{\psi}(p), \hat{\psi}(p) > = \int_a^b |\hat{\psi}(p)\,|^2\, dp.$$

Isto é o que afirma o postulado 7.

Se considerarmos o item 6) acima

$$f(A) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)\, dE(\lambda),$$

para $f(\lambda) = I_{[a,b]}$, obtemos

$$I_{[a,b]}(A) = \int_a^b dE(\lambda),$$

e, assim,

$$< I_{[a,b]}(A)(\psi), \psi > = \int_a^b d < E(\lambda)(\psi), \psi > .$$

O valor assim obtido é a probabilidade da medição de A estar em $[a,b]$.

Vamos mostrar mais abaixo que se $\tilde{\lambda} \in \rho(A)$, então existe um intervalo aberto (a,b) contendo $\tilde{\lambda}$, tal que $I_{[a,b]}(A) = 0$.

Desta forma podemos concluir que a probabilidade da medição obtida num estado ψ qualquer, via o observável A, estar no resolvente de A é nula. Ou seja, apenas valores no espectro de A serão obtidos via uma medição do observável A.

Se por acaso, $A = \sum_n \lambda_n\, P_{\psi_n}$, onde os ψ_n formam um conjunto ortonormal enumerável completo, afirmamos antes que apenas os autovalores λ_n podem ser obtidos como resultado da medição de A num estado ψ. Vamos obter agora esta propriedade a partir do Teorema Espectral e do Postulado 8.

Ora, ψ pode ser escrito como $\psi = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\, \psi_n$.

Considere um intervalo $[\alpha, \beta]$ que contenha apenas o autovalor λ_k, onde k está fixo.

Assim

$$\int_{\alpha}^{\beta} d < E(\lambda)(\psi), \psi > = < E(\beta)(\psi), \psi > - < E(\alpha)(\psi), \psi > = |a_k|^2.$$

Determinamos assim a probabilidade de λ_k ocorrer através da medição de A no estado ψ.

Considere um intervalo $[\alpha, \beta]$ que não contenha o autovalores.

Então,

$$\int_{\alpha}^{\beta} d < E(\lambda)(\psi), \psi > = < E(\beta)(\psi), \psi > - < E(\alpha)(\psi), \psi > = 0.$$

Proposição 2.2. $1(A) = I$ *(o operador identidade).*

Demonstração. Note que $I_{(-\infty,k]}(\lambda) \leq 1$, para qualquer $x, \lambda \in \mathbb{R}$, e $k \in \mathbb{N}$.

Assim, para qualquer ψ vale $I_{(-\infty,k]}(A)(\psi) \to 1(A)(\psi)$ pelo item 10) acima. Pelo item 9) temos que $I_{(-\infty,k]}(A) = E(k)$. Finalmente, como pelo item 3) sabemos que $\lim_{k\to\infty} E(k)(\psi) = \psi$, concluímos que para todo ψ vale $1(A)(\psi) = \psi$.

□

Note que qualquer função está no domínio de $1(A)$.

Segue do resultado acima que

$$|\psi|^2 = < \psi, \psi > = \int_{-\infty}^{\infty} d < E(\lambda)(\psi), \psi > .$$

Proposição 2.3. *Se* $g : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ *é limitada, então,* $g(A)$ *é um operador limitado.*

Demonstração. Seja $c = \sup_{\lambda\in\mathbb{R}} |g(\lambda)|$.

Então para todo ψ

$$|g(A)(\psi)|^2 = < g(A)(\psi), g(A)(\psi) > = \int_{-\infty}^{\infty} |g(\lambda)|^2 \, d < E(\lambda)(\psi), \psi > \leq$$

$$c^2 \int_{-\infty}^{\infty} d < E(\lambda)(\psi), \psi >= c^2\, |\psi|^2,$$

onde a desigualdade segue do item 7) e a ultima igualdade da Prop 2.2.

Desta forma, $g(A)$ é limitado.

□

Proposição 2.4. *Se $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ é não negativa, então, $g(A)$ é um operador positivo.*

Demonstração. Para um ψ qualquer vale

$$< g(A)(\psi), (\psi) >= \int_{-\infty}^{\infty} g(\lambda)\, d < E(\lambda)(\psi), \psi >\geq\ 0.$$

□

Teorema 2.5. *Se A é autoadjunto, então todo número z em $\mathbb{C} - \mathbb{R}$ está no resolvente de A. De outra forma: o espectro de H está contido na reta real.*

Demonstração. Se z não é real, então $f(\lambda) = \frac{1}{z-\lambda}$ é uma função limitada. Desta forma, pela proposição anterior, temos que $f(A)$ é um operador limitado.

Note que $(z-\lambda)\,\frac{1}{z-\lambda} = 1 = \frac{1}{z-\lambda}\,(z-\lambda)$, Usando o item 11), e, o fato que $1(A) = I$, concluímos que

$$f(A)\,(z\,I - A) = I = (z\,I - A)\,f(A).$$

Sendo assim z está no resolvente de A.

□

Desejamos mostrar que apenas valores do espectro do operador A podem ser obtidos como resultado de medições de estados. Este será o foco dos nossos próximos resultados.

Teorema 2.6. *Se $W = (a, b) \subset \mathbb{R}$, A é autoadjunto e, $I_W(A) = 0$, então, $W \subset \rho(A)$.*

Demonstração. Seja $\tilde{\lambda} \in W$ (sua distância a a, b é positiva). Considere g tal que $g(\lambda) = (\tilde{\lambda} - \lambda)^{-1}$, quando λ não está em W, e, $g(\lambda) = 0$, para $\lambda \in W$. Assim, $g(A)$ é um operador autoadjunto limitado.

Note que
$$g(\lambda)\,(\tilde{\lambda} - \lambda) = 1 - I_{(a,b)}(\lambda).$$

Assim, pelo item 11) temos que para $\psi \in \mathcal{H}$

$$(\tilde{\lambda} I - A)\, g(A) = I - I_{(a,b)}(A) = I,$$

e, para $\psi \in D(A)$,

$$g(A)\,(\tilde{\lambda} I - A) = I - I_{(a,b)}(A) = I.$$

Assim, $\tilde{\lambda} \in \rho(A)$.

□

Corolário 2.7. *Fixado um operador autoajunto A, dados $a < b$, se $E(b) = E(a)$, então, $(a, b) \subset \rho(A)$.*

Demonstração. Segue do Teorema anterior e do fato que $I_{[a,b]}(A) = \int_a^b dE^A(\lambda) = E^A(b) - E^A(a)$.

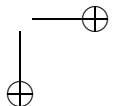
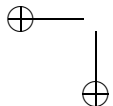
□

É possível mostrar o seguinte fato (XII 2.8 Theorem 9 [102]):

Teorema 2.8. *Dado o operador autoadjunto A e sua decomposição espectral $E^A(\lambda)$, considere $f(\lambda)$ real continua e o operador $f(A)$ com sua respectiva decomposição espectral $E^{f(A)}(\lambda)$. Então,*

$$\int_a^b d\, E^{f(A)}(\lambda) = \int_{f^{-1}(a,b)} d\, E^A(\lambda).$$

Note que pelo Postulado 8 a probabilidade de que a medição do observável $f(A)$ no estado ψ esteja no intervalo $[a, b]$, é dada por

$$\int_a^b d < E^{f(A)}(\lambda)(\psi), \psi > .$$

Pode-se mostrar, a partir do teorema acima, que para qualquer função integrável g vale

$$\int g(\lambda) d\, E^{f(A)}(\lambda) = \int (g \circ f)(\lambda) d\, E^{A}(\lambda).$$

Exemplo 2.4. O resultado acima permite afirmar, por exemplo, que o espectro do operador $B = \mathcal{X}^4 + 7\, I$ esta contido em $[7, \infty)$.

De fato, note que fixada qualquer ψ e $f(\lambda) = \lambda^4 + 7$, temos que se $[a, b] \cap [7, \infty) = \emptyset$, então, fixado ψ, para todo ϕ vale

$$< I_{[a,b]}(B)(\psi)\, ,\, \phi >= \int_a^b d < E^B(\lambda)(\psi), \phi >= \int_{f^{-1}(a,b)} d\ < E^{\mathcal{X}}(\lambda)(\psi), \phi >= 0.$$

Isto implica que $I_{[a,b]}(B) = 0$, e assim, pelo Teorema 2.6 temos que $[a, b] \subset \rho(B)$.

Como vimos:

Definição 2.2. O complemento $\rho\,(A) = \mathbb{C} \backslash \sigma\,(A)$ do espectro de A é chamado *conjunto resolvente de* A, e, para $\lambda \in \rho\,(A)$, o operador $(A - \lambda I)^{-1}$, chamado o *resolvente de* A, está bem definido e é limitado.

Como veremos as razões pelas quais $A - \lambda I$ não é inversível poderiam ser

1. Existe algum $\psi \in \mathcal{H}$ não nulo tal que $(A - \lambda I)\, \psi = 0$. Neste caso λ é chamado um *autovalor* de A e ψ um *autovetor* correspondente;

2. Existe uma seqüência de Weyl $\{\psi_n\} \subset \mathcal{H}$ para A e λ.

Definição 2.3. Dados um operador A e um número complexo λ, uma seqüência $\{\psi_n\} \subset \mathcal{D}(A)$ é dita *seqüência de Weyl* para A e λ se

- $\|\psi_n\| = 1\ \forall n$;
- $\|\, (A - \lambda I)(\psi_n))\, \| \to 0$, quando $n \to \infty$;
- $\psi_n \to 0$, *fracamente* quando $n \to \infty$ (ou seja, $\forall f \in \mathcal{H}$, $\langle f, \psi_n \rangle \to 0$).

A expressão $\|\,(A-\lambda I)(\psi_n))\,\| \to 0$ pode ser entendida da seguinte forma: A "quase"tem uma autofunção ψ_n associada ao autovalor λ. A ultima condição impede que um autovalor isolado de multiplicidade finita tenha sequencia de Weyl. Uma ótima referencia no assunto é [321].

Definição 2.4. O *espectro pontual* de um operador A é

$$\sigma_p\,(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \lambda \text{ é autovalor isolado de } A \text{ com multiplicidade finita}\}\,.$$

Definição 2.5. O *espectro contínuo* de um operador A é

$$\sigma_c\,(A) = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid \text{existe uma seqüência de Weyl para } A \text{ e } \lambda\}\,.$$

Pode se mostrar que os conjuntos $\sigma_p\,(A)$ e $\sigma_c\,(A)$ são disjuntos.

Note que se um autovalor tiver multiplicidade infinita ele faz parte do espectro continuo.

Escólio

Observe que $\sigma_c(A)$ é um conjunto fechado. De fato, seja $\lambda \in \mathbb{C}$ e $\lambda_k \in \sigma_c(A)$ tal que $\lambda_k \to \lambda$. Seja $f_1, f_2, ...$ um conjunto enumerável denso em $\mathcal{H}$. Pela definição 2.3, para cada k existe $\psi_k \in \mathcal{D}(A)$ tal que $|\psi_k| = 1$, $|(A - \lambda_k\, I)(\psi_k)| < 1/k$ e $| < f_j\,,\, \psi_k > | < 1/k$, se $1 \leq j \leq k$

Temos que

$$|(A - \lambda\, I)(\psi_k)| \leq |(A - \lambda_k)(\psi_k)| + |\lambda_k - \lambda|.$$

Logo, $|(A - \lambda\, I)(\psi_k)| \to 0$, se $k \to \infty$.

Além disto, sejam $f \in \mathcal{H}$ e $\epsilon > 0$. Então existe j tal que $|f - f_j| < \epsilon$. Assim

$$| < f, \psi_k > | \leq | < (f - f_j), \psi_k > | + | < f_j, \psi_k > | < \epsilon + | < f_j, \psi_k > |.$$

Decorre daí que $\limsup_{k\to\infty} | < f, \psi_k > | \leq \epsilon$.

Finalmente, $\lim_{k\to\infty} | < f, \psi_k > | = 0$.

O próximo teorema não será demonstrado (ver [156] para referência.)

Teorema 2.9. (**Weyl**) Se um operador A é auto-adjunto então $\sigma\,(A) = \sigma_p\,(A) \cup \sigma_c\,(A)$.

Observação 1: Observamos que se A um operador auto-adjunto limitado, então,

$$\sigma(A) \subset [-\|A\|, \|A\|] \,.$$

Isto segue do fato que se $|\lambda| > |A|$, então

$$|(A - \lambda\, I)(u)| \geq (\,|\lambda| - |A|\,)\; |u|.$$

Desta forma, para tais λ não existe sequência de Weyl.

Corolário 2.10. *Fixado um operador autoajunto A, dados $a < b$, suponha que $I_{[a,b]}(A) \neq 0$, então, 1 é autovalor de $I_{[a,b]}(A)$.*

Demonstração. Considere um intervalo fechado $[c, d]$ que não contenha nem o ponto 1 nem o ponto 0.

Vamos mostrar primeiro que a aplicação da função $I_{[c,d]}(\lambda)$ ao operador $I_{[a,b]}(A)$ resulta no operador zero. Desta forma, pelo teorema 2.6 concluímos que $(c, d) \subset \rho(I_{[a,b]}(A))$.

Segue do Teorema 2.8 que para qualquer f e g vale

$$\int g(\lambda) d\, E^{f(A)}(\lambda) = \int (g \circ f)(\lambda) d\, E^{A}(\lambda).$$

Considere $f = I_{[a,b]}(\lambda)$ e $g = I_{[c,d]}(\lambda)$, onde $[c, d]$ não contém o valor 1.

Assim, como $I_{[c,d]} \circ I_{[a,b]} = 0$, temos que

$$\int I_{[c,d]}(\lambda)\, d\, E^{I_{[a,b]}(A)}(\lambda) = \int (I_{[c,d]} \circ I_{[a,b]})(\lambda) d\, E^{A}(\lambda) = 0.$$

Variando o intervalo genérico $[c, d]$ segue do descrito acima que o espectro de $I_{[a,b]}(A)$ está contido no conjunto com dois elementos $\{0, 1\}$. Como $I_{[a,b]}(A) \neq 0$ é um operador limitado (conforme proposição 2.3) seu espectro (que não é vazio) não pode ser apenas o ponto 0.

Logo 1 está no espectro de $I_{[a,b]}(A)$ e é isolado. Assim, pelo último teorema ele tem que ser um autovalor.

$\square$

Teorema 2.11. *Se $\tilde{\lambda} \in \rho(A)$, então existe um intervalo aberto $W = (a, b)$ contendo $\tilde{\lambda}$, tal que, $I_W(A) = 0$.*

Demonstração. A demonstração é por contradição. Suponha existirem intervalos $W_n = (a_n, b_n)$, $n \in \mathbb{N}$, contendo $\tilde{\lambda}$, com diâmetro tendendo a zero, e, tais que $I_{W_n}(A) \neq 0$.

A partir do último resultado acima, para cada n se pode encontrar ψ_n, tal que $I_{W_n}(A)(\psi_n) = \psi_n$, $n \in \mathbb{N}$, e $|\psi_n| = 1$

Desta forma, pelo item 7) do Teorema Espectral temos que

$$|(\tilde{\lambda} I - A)(\psi_n)| = |(\tilde{\lambda} I - A)\, I_{W_n}(A)(\psi_n)| =$$

$$\sqrt{< (\tilde{\lambda} I - A)\, I_{W_n}(A)(\psi_n), (\tilde{\lambda} I - A)\, I_{W_n}(A)(\psi_n) >} \leq \sup_{\lambda \in W_n} |\tilde{\lambda} - \lambda| \to 0,$$

quando $n \to \infty$.

Ora, isto implica que se denotamos por $R(\tilde{\lambda})$ o operador inverso de $(\tilde{\lambda} I - A)$, então

$$|\psi_n| = |R(\tilde{\lambda})\, (\tilde{\lambda} I - A)(\psi_n)| \leq |R(\tilde{\lambda})|\, |(\tilde{\lambda} I - A)(\psi_n)| \to 0.$$

Mas isto contraria $|\psi_n| = 1$.

Logo segue a afirmação do teorema.

□

Observe que segue do acima apresentado que $E^A(\lambda)$ é constante no intervalo (a, b), se e somente se, $(a, b) \subset \rho(A)$. Isto segue dos Teoremas 2.6, 2.7 a 2.11.

Teorema 2.12. *O resolvente de A autoadjunto é um conjunto aberto.*

Demonstração. Se z não é real existe uma vizinhança de z que também esta no resolvente. Se z é real, então pelos dois teoremas anteriores, sabemos que ele está num intervalo (a, b) contido no resolvente de A.

□

Teorema 2.13. *Dado um observável A, apenas valores do espectro de A podem ser atingidos como resultado de uma medição de A num estado qualquer ψ.*

Demonstração. Dado β que não está no espectro de A, sabemos que existe intervalo $W = (a, b)$ tal que $\beta \in W$ e que $I_W(A) = 0$

Pelo Teorema Espectral item 7) temos que a probabilidade de que a medição de A esteja em W é

$$\int_a^b d < E(\lambda)(\psi), \psi >= \int I_W(\lambda) d < E(\lambda)(\psi), \psi >=< \psi, I_W(A)(\psi) >= 0.$$

□

Proposição 2.14. *Considere o operador* $\mathcal{X}_j$, $j \in \{1, 2, ., n\}$, *agindo em* $L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$ *definido por*

$$\mathcal{X}_j \psi\,(x) = x_j \psi\,(x)\,.$$

Então $\sigma\,(\mathcal{X}_j) = \sigma_c\,(\mathcal{X}_j) = \mathbb{R}$.

Demonstração. Seja $d = 1$ por simplicidade. Já mostramos que $\sigma\,(\mathcal{X}) = \mathbb{R}$. Desejamos mostrar que $\sigma_c\,(\mathcal{X}) = \mathbb{R}$. Resulta do teorema de Weyl que $\mathcal{X}$ não tem autovalores isolados de multiplicidade finita

Vamos encontrar para todo $\lambda \in \mathbb{R}$ uma seqüência de Weyl para $\mathcal{X}$ e λ. Seja ϕ uma função não negativa, normalizada e com suporte em $[-1, 1]$, ou seja,

$$\int |\phi\,(x)\,|^2 dx \;=\; \int_{-1}^{1} |\phi\,(x)\,|^2 dx = 1$$

Considere, para cada n, a função ψ_n dada por $\psi_n\,(x) = n^{1/2}\phi\,(n\,(x-\lambda))$. Temos que

$$\int |\psi_n\,(x)\,|^2 dx = \int n|\phi\,(n\,(x-\lambda))\,|^2 dx = \int |\phi\,(y)\,|^2 dy = 1,$$

onde fizemos a mudança de variáveis $y = n\,(x-\lambda)$. Sendo assim,

$$\|\,(\mathcal{X}-\lambda I)\,\psi_n\|^2 = \|\,(x-\lambda)\,\psi_n(x)\|^2 =$$

$$\int |x-\lambda|^2 n|\phi\,(n\,(x-\lambda))\,|^2 dx = \frac{1}{n^2}\int |y|^2|\phi\,(y)\,|^2 dy.$$

O último termo claramente vai a zero quando $n \to \infty$. Logo vemos que $\|\,(\mathcal{X}-\lambda I)\,\psi_n\| \to 0$ com $n \to \infty$. Desta forma, as duas primeiras

“quantum2
2019/12/13
page 200

condições para que $\{\psi_n\}$ seja uma seqüência de Weyl para $\mathcal{X}$ e λ estão satisfeitas. Nos resta mostrar que $\psi_n \to 0$ fracamente. Dada $f \in L^2(\mathbb{R})$ temos que

$$|\int \bar{\psi}_n f| = |\int_{|x-\lambda|\le 1/n} \bar{\psi}_n f| \le \left(\int |\psi_n|^2\right)^{1/2} \left(\int_{|x-\lambda|\le 1/n} |f|^2\right)^{1/2}$$

e assim, a expressão acima vai a 0 quando $n \to \infty$. Logo temos que $\lambda \in \sigma_c(\mathcal{X})$.

Assim, todo número real é autovalor.

□

Proposição 2.15. *Para o operador momento $\mathcal{P}_j$, $j \in \{1, 2, ., n\}$, vale que $\sigma(\mathcal{P}_j) = \sigma_c(\mathcal{P}_j) = \mathbb{R}$.*

Demonstração. Seja $\lambda \in \mathbb{R}$. Vamos demonstrar o resultado no caso unidimensional. A função $\phi(x) = e^{\frac{i\lambda}{\hbar}x}$ satisfaz

$$\lambda\phi(x) = -i\,\hbar\phi'(x).$$

Isto não a qualifica para ser autovalor porque não está em L^2.

A idéia e multiplicar ϕ por uma outra função indexada por n, para faze-la em L^2, e, assim obter uma sequencia de Weyl.

Seja $\psi(x) = c\,e^{-x^2}$, onde $c > 0$ é a constante que normaliza ψ para que $|\psi| = 1$.

Defina $\phi_n = n^{-1/2}\,\psi(x/n)\,\phi(x)$. É fácil ver que $|\phi_n| = 1$ para todo n. Ainda,

$$\phi_n'(x) = n^{-3/2}\,\psi'(x/n)\,\phi(x) + \frac{i\,\lambda}{\hbar}\,\phi_n(x).$$

Desta forma

$$\mathcal{P}(\phi_n) = \lambda\phi_n - i\,\hbar\,n^{-3/2}\,\psi'(x/n)\,\phi(x).$$

Finalmente,

$$|(\mathcal{P} - \lambda I)(\phi_n)|^2 = \int \hbar^2\,n^{-3}\,(\psi'(x/n))^2\;dx = \hbar^2\,n^{-2}\int (\psi'(y))^2\;dy.$$

Como $\int (\psi'(y))^2\,dy$ é finita, temos que ϕ_n, $n \in \mathbb{N}$, define uma sequencia de Weyl. Sendo assim, λ está no espectro.

Vamos mostrar agora que $\phi_n \to 0$ fracamente. Seja $f \in \mathcal{L}(\mathbb{R})$, então

$$| < \phi_n, f > | = | \int \phi_n(x)\, \overline{f(x)} dx| \leq$$

$$\int |\phi_n(x)|\, |f(x)|\, dx = n^{-1/2} \int \psi(x/n)\, |f(x)| dx.$$

Vamos separar em três partes esta integral. Seja $\epsilon > 0$ e $A > 0$ tais que $\int_{-\infty}^{-A} |f(x)|^2 dx < \epsilon$ e $\int_A^{\infty} |f(x)|^2 dx < \epsilon$.

Ora, para qualquer n vale

$$\int_{-A}^{A} \psi(x/n)\, |f(x)|\, dx \leq (\int_{-A}^{A} \psi(x/n)^2 \; dx)^{1/2} (\int_{-A}^{A} |f(x)|^2 \; dx)^{1/2} \leq$$

$$n^{1/2} (\int_{-A/n}^{A/n} \psi(y)^2 \; dy)^{1/2}\, |f| \leq n^{1/2}\, c\, (\frac{2\,A}{n})^{1/2}\, |f| = c\, (2\,A)^{1/2}\, |f|,$$

porque $0 \leq \psi(x) \leq c$ para todo x.

Ainda,

$$\int_{-\infty}^{-A} \psi(x/n)\, |f(x)|\, dx \leq (\int_{-\infty}^{-A} \psi(x/n)^2 \; dx)^{1/2} (\int_{-\infty}^{-A} |f(x)|^2 \; dx)^{1/2} \leq$$

$$\epsilon^{1/2} (\int_{-\infty}^{-A} \psi(x/n)^2 \; dy)^{1/2}\, |f| \leq \epsilon^{1/2} n^{1/2} \; (\int_{-\infty}^{-A/n} \psi(y)^2 \; dy)^{1/2} = \epsilon^{1/2}\, n^{1/2}\,,$$

porque $|\psi| = 1$.

Da mesma forma $\int_A^{\infty} \psi(x/n)\, |f(x)|\, dx \leq \epsilon^{1/2}\, n^{1/2}$.

Somando as desigualdades e multiplicando por $n^{1/2}$, resulta

$$| < \phi_n, f > | \leq n^{-1/2}\, (2\,A)^{1/2}\, |f|\, c + 2\; e^{1/2}.$$

Logo,

$$\limsup_{n \to \infty} | < \phi_n, f > | \leq 2\sqrt{\epsilon}.$$

□

Proposição 2.16. Se $\lambda \in \mathbb{C}$ é ponto de acumulação de $\sigma\,(A)$, onde A é um operador auto-adjunto, então $\lambda \in \sigma_c\,(A)$.

Demonstração. Seja $\{\lambda_j\} \subset \sigma(A)$ uma seqüência tal que $\lambda_j \to \lambda$, com $j \to \infty$. Então podemos encontrar (via sequencia de Weyl) $\{\psi_j\} \subset \mathcal{H}$, uma seqüência no espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, satisfazendo $\|(A - \lambda_j I)\psi_j\| \leq 1/j$. Note que se λ_j é um autovalor, então a escolha seria tal que $\|(A - \lambda_j I)\psi_j\| = 0$. De qualquer forma a expressão é válida. Como vale

$$\|(A - \lambda I)\psi_j\| \leq \|(A - \lambda_j I)\psi_j\| + |\lambda - \lambda_j|\|\psi_j\|$$

então a expressão acima vai a 0 com $j \to \infty$. Assim vemos que $\lambda \in \sigma(A)$ (pode-se mostrar que ou $\psi_j \to 0$ fracamente ou λ é um autovalor de A). Como λ é ponto de acumulação de $\sigma(A)$ ele não é ponto isolado. Portanto, vale $\lambda \in \sigma_c(A)$.

□

Note que um autovalor de multiplicidade infinita pode ser acumulado por elementos do espectro.

Para analisar o operador de Schrodinger necessitamos de um conceito que é uma pequena modificação do que foi descrito anteriormente quando introduzimos sequencia de Weyl.

Definição 2.6. Dados um operador A e um número complexo λ. Uma seqüência $\{\psi_n\} \subset L^2(\mathbb{R}^d)$ é dita uma *spreading sequence* para A e λ se

- $\|\psi_n\| = 1$, $\forall n$;
- $\|(A - \lambda I)(\psi_n)\| \to 0$, quando $n \to \infty$;
- para todo conjunto limitado $B \subset \mathbb{R}^d$, $supp(\psi_n) \cap B = \emptyset$, para n suficientemente grande.

A diferença fundamental do conceito anterior é que o suporte das ψ_n vai ao infinito quando $n \to \infty$.

Teorema 2.17. Se $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$ é um operador de Schrödinger com potencial real e limitado inferiormente então

$$\sigma_c(H) = \{\lambda \mid \text{existe uma spreading sequence para } H \text{ e } \lambda\}.$$

Uma excelente referencia para a teoria espectral de diversos operadores que aparecem naturalmente na Mecânica Quântica é [167]

Considere o operador de Schrödinger $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mathcal{V}$ em $L^2(\mathbb{R}^d)$.

Teorema 2.18. Seja $V(x)$ uma função contínua em $\mathbb{R}^d$ satisfazendo $V(x) \geq 0$, e $V(x) \to \infty$ com $|x| \to \infty$. Então

1. $\mathbf{H}$ é auto-adjunto
2. $\sigma(\mathbf{H})$ consiste de autovalores isolados $\{\lambda_n\}_{n=0}^{\infty}$, com $\lambda_n \to \infty$ quando $n \to \infty$.

Demonstração. A demonstração de que $\mathbf{H}$ é autoadjunto pode ser obtida em [182]. Vamos mostrar o segundo item.

A demonstração será por contradição. Suponha que λ está no espectro contínuo, e, que ψ_n, $n \in \mathbb{N}$, é uma sequência spreading associada.

Lembre que se $\int |\psi_n|^2 \, dx < \infty$, então $\psi_n(x) \to 0$ quando $x \to \infty$

Assim quando $n \to \infty$, temos que (usando integração por partes)

$$< \psi_n, (H - \lambda I)\psi_n > = < \psi_n, -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle \psi_n > + < \psi_n, \mathcal{V}\psi_n > -\lambda =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi_n \overline{\sum_j \frac{\partial^2}{\partial^2 x_j} \psi_n(x)} \, dx + \int |\psi_n|^2 \, V(x) \, dx - \lambda =$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int \sum_j |\frac{\partial}{\partial x_j} \psi_n(x)|^2 \, dx + \int |\psi_n|^2 \, V(x) \, dx - \lambda \geq$$

$$\inf_{y \in \text{support of } \psi_n} V(y) - \lambda.$$

Como o suporte de ψ_n vai para infinito, e, V fica arbitariamente grande quando $x \to \infty$, temos que $\lim_{n\to\infty} [\inf_{y \in \text{support of } \psi_n} V(y) - \lambda] = \infty$. Isto contraria o fato que $\lim_{n\to\infty} |(H - \lambda I)\psi_n| = 0$. Desta forma não existe espectro contínuo.

Vamos mostrar que existe uma subsequencia da autovalores convergindo a infinito.

Sejam $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq ... \leq \lambda_k$ os primeiros k autovalores, e, ψ_j, $j \in \{1, 2, ..., k\}$, as correspondentes autofunções ortogonais. Seja F_k o subespaço gerado por estas autofunções. Sabemos pelo Princípio do Mini-Max (ver Teorema 2.26) que

$$\inf_{\{\psi |\, \psi \in F_k^{\perp} \cap D(\mathbf{H}),\, |\psi|=1\}} < \psi, \mathbf{H}(\psi) > = \inf \{\sigma(\mathbf{H}) - \{\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_k\}\}.$$

Assim,

$$\inf_{\{\psi |\, \psi \in F_k^{\perp} \cap D(\mathbf{H}),\, |\psi|=1\}} < \psi, \mathbf{H}(\psi) > = \inf \{\sigma_p(\mathbf{H}) - \{\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_k\}\}.$$

Desta forma a expressão acima é o próximo auotovalor λ_{k+1}. Note que λ_{k+1} poderia ser igual a λ_k, mas podemos tomar uma ψ_{k+1} que é autofunção de λ_{k+1}, e, ortogonal as anteriores.

Podemos repetir este argumento indutivamente infinitas vezes obtendo sempre novas autofunções. Como cada autovalor tem multiplicidade finita concluímos que existe infintos autovalores.

Como $\mathbf{H}$ não possui espectro contínuo, e $< H(\phi), \phi > \geq 0$, para todo ϕ, estes autovalores ordenados não podem se acumular dentro de um intervalo fechado e limitado. Desta forma os autovalores ordenados λ_k convergem a infinito quando $k \to \infty$. Esta afirmação requer uma demonstração que não será apresentada.

□

De forma heurística podemos dizer que o fato do potencial V convergir a infinito, num certo sentido, indica que existe uma força que age sobre a partícula impedindo que ela vá a infinito. Assim, estados estacionários (as autofunções do operador de Schrodinger) aparecem de forma natural neste setting quântico. O potencial V desempenha aqui um papel semelhante ao *drift* na Teoria das Equações Diferenciais Estocásticas [200]. Só que, de forma diferente da Teoria dos Processos Estocásticos (ergódicos), na Mecânica Quântica em geral existe mais de um estado estacionário.

A ideia da demonstração do resultado acima permite obter:

Teorema 2.19. *Seja $V(x)$ uma função contínua em $\mathbb{R}^d$ satisfazendo $\inf V(x) = \alpha$, então o espectro do correspondente operador de Schrodinger $\mathbf{H}$ está contido em $[\alpha, \infty)$.*

Demonstração. Suponha que $\lambda < \alpha$ está no espectro contínuo de $\mathbf{H}$, e, que ψ_n, $n \in \mathbb{N}$, é uma sequência spreading associada.

Usando novamente integração por partes temos

$$|\psi_n| \, |(\mathbf{H} - \lambda I)\psi_n| \geq < \psi_n, (\mathbf{H} - \lambda I)\psi_n > = < \psi_n, -\frac{\hbar^2}{2m} \triangle \psi_n > + < \psi_n, \mathcal{V}\psi_n > -\lambda =$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int \psi_n \overline{\sum_j \frac{\partial^2}{\partial^2 x_j} \psi_n(x)} \, dx + \int |\psi_n|^2 \, V(x) \, dx - \lambda =$$

$$\frac{\hbar^2}{2\,m}\int \sum_j |\frac{\partial}{\partial x_j}\,\psi_n(x)|^2\;dx + \int |\psi_n|^2\;V(x)\;dx - \lambda \geq$$

$$\inf_{y \in \text{support of } \psi_n} V(y) - \lambda \geq \alpha - \lambda > 0.$$

Como a norma de ψ_n é igual a 1, e, ainda sabemos que $\alpha - \lambda > 0$, então não pode ocorrer $\lim_{n\to\infty} |(\mathbf{H} - \lambda\, I)\psi_n| = 0$. Desta forma o espectro contínuo está contido em $[\alpha, \infty)$.

Observe que o raciocínio é válido sem utilizar o Teorema 2.17. Basta assumir que ψ_n é uma sequencia de Weyl.

Se λ é autovalor de $\mathbf{H}$ e ψ é a correspondente autofunção com norma igual a 1, então

$$\lambda =< \psi, \mathbf{H}\psi >=< \psi, -\triangle\psi > + < \psi, \mathcal{V}\psi >=$$

$$-\int \psi\;\overline{\sum_j \frac{\partial^2}{\partial^2 x_j}\,\psi(x)}\;dx + \int |\psi|^2\;V(x)\;dx- =$$

$$\int \sum_j |\frac{\partial}{\partial x_j}\,\psi(x)|^2\;dx + \int |\psi|^2\;V(x)\;dx \geq$$

$$\inf V(y) = \alpha.$$

Logo, $\lambda \geq \alpha$.

$\square$

O Teorema acima afirma que apenas pontos na imagem do Hamiltoniano clássico $H(q,p)$ podem ser atingidos como resultado de medições da energia de um estado.

Teorema 2.20. Seja $\Lambda = [0,a]^n$ um cubo em $\mathbb{R}^n$ e $V\,(x)$ uma função contínua em Λ. Então

1. $\mathbf{H}$ é auto-adjunto em $L^2\,(\Lambda)$, *assumindo condições de fronteira de Dirichlet,*

2. $\sigma\,(\mathbf{H}) = \sigma_p\,(\mathbf{H}) = \{\lambda_n\}_{n=0}^{\infty}$, com $\lambda_n \to \infty$, quando $n \to \infty$.

Demonstração. Vamos mostrar apenas o item 2.

Considere para $k \in \mathbb{N}$ o vetor $K^k = (K_1^k, K_2^k, ..., K_n^k) \in ([\pi/L]\ \mathbb{N})^n$,

$$\phi_k = (2/a)^{n/2}\, \Pi_{j=0}^{n} \sin(K_j^k\, x_j).$$

Como $-\triangle\phi_k = |K^k|^2\, \psi_k$, e, os ϕ_k determinam um conjunto ortonormal completo para o espaço de Hilbert em consideração, concluímos que o espectro de $-\triangle$ é o conjunto dos números da forma $|K^k|^2$, $k \in \mathbb{N}$. No caso unidimensional ($n = 1$) cada autovalor tem multiplicidade 1.

Observamos que cada ψ no espaço de Hilbert em consideração pode ser escrito como

$$\psi = \sum_{k \in \mathbb{N}} < \phi_k, \psi > \ \phi_k.$$

Vamos mostrar primeiro que o espectro contínuo de $\mathbf{H}$ é vazio. Suponha, por contradição, que exista $\lambda \in \sigma_c(\mathbf{H})$. Seja ψ_n uma sequencia de Weyl para $\mathbf{H}$ e λ.

Note que

$$|(\mathbf{H} - \lambda I)(\psi_n) \geq |(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle - \lambda\, I)(\psi_n)| - |\mathcal{V}(\psi_n)| \geq$$

$$|(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle - \lambda\, I)(\psi_n)| - \sup V.$$

Escrevendo cada ψ_n na forma $\psi_n = \sum_k a_n^k \phi_k$, e usando o fato que $|K^k|^2$ é o autovalor de ϕ_k, obtemos

$$(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle - \lambda\, I)\psi_n = \sum_k (|K^k|^2 - \lambda) a_n^k \phi_k.$$

Sendo assim, pela relação de Parseval temos que

$$|(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle - \lambda\, I)\psi_n|^2 = \sum_k (|K^k|^2 - \lambda)^2\, |a_n^k|^2.$$

Como, para cada n, vale $|\psi_n| = 1$, então $\sum_k |a_n^k|^2 = 1$.

Como V é limitado, temos que existe $K > 0$, tal que para todo $|K^k| > K$, vale

$$|K^k|^2 - \lambda \geq 2\,(\sup |V| + 1).$$

Assim, a partir do que foi obtido acima temos que

$$|(-\triangle - \lambda I)(\psi_n)|^2 \geq 4\,(\sup |V| + 1)^2 \sum_{k \text{ tais que } |K^k| > K} |a_n^k|^2 =$$

$$4\,(\sup |V| + 1)^2\,(1 - \sum_{k \text{ tais que } |K^k| < K} |a_n^k|^2).$$

Para cada k fixo, como $\psi_n \to 0$ fracamente, então, quando $n \to \infty$,

$$a_n^k =< \phi_k, \psi_n > \to 0.$$

Existem finitos elementos $|K^k| < K$.

Sendo assim, é possível escolher $N > 0$ tal que para $n > N$, temos que $\sum_{k \text{ tais que } |K^k| < K} |a_n^k|^2 < 3/4$.

Desta forma existe uma constante $c > 0$, tal que, para todo $n > N$, vale

$$|(-\triangle - \lambda I)(\psi_n)|^2 \geq \ (\sup |V| + 1)^2 + c \geq \sup V^2 + c.$$

Como,

$$|(\mathbf{H} - \lambda I)(\psi_n)| \geq |(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle - \lambda\,I)(\psi_n)| - \sup V,$$

concluímos que $|(\mathbf{H} - \lambda I)(\psi_n)$ é maior do que uma constante positiva se $n > N$. Isto contradiz o fato que ψ_n é uma sequencia de Weyl.

Desta forma o espectro contínuo é vazio. Os autovalores de $\mathbf{H}$ não podem acumular em um intervalo limitado por um argumento similar ao usado na Prop. 2.16. Note que como $< \mathbf{H}(\phi, \phi), \phi > \geq \ \inf_{\mathbf{x}} \ \mathbf{V}\,|\phi|^{\mathbf{2}}$, então o conjunto dos autovalores é limitado inferiormente.

□

2.2 Valores atingidos por observáveis

Nesta seção vamos tratar de questões relativas aos possiveis valores assumidos pelo espectro do operador Hamiltoniano.

Teorema 2.21. *O espectro de $-\triangle$, agindo em $L^2\left(\mathbb{R}^d\right)$, é $\sigma(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle)_c = [0, \infty)$. O mesmo vale para $\mathbf{H}_0$.*

Demonstração. Vamos tratar apenas do caso unidimensional para facilitar a notação.

Uma tentativa natural para $-\triangle$ seria considerar para cada $\gamma > 0$ a função $e^{i\sqrt{\gamma}x}$. Assim

$$-\frac{d^2}{dx^2}e^{i\sqrt{\gamma}x} = \gamma e^{i\sqrt{\gamma}x}.$$

Assim, obteríamos uma autofunção para cada $\lambda = \gamma > 0$. O problema é que $e^{i\sqrt{\gamma}x}$ não está em L^2.

Vamos escrever $\lambda \geq 0$ na forma $\lambda = \frac{\hbar^2\gamma^2}{2\,m}$.

Considere $\phi = c\,e^{-x^2}$, onde c é a constante positiva tal que $|\phi| = 1$. Considere $\psi_n = n^{-1/2}\,\phi(x/n)\,e^{i\gamma x}$. É fácil ver que $|\psi_n|$=1.

Ainda,

$$\psi_n'(x) = i\gamma\psi_n(x) + \phi'(x/n)e^{i\gamma x}n^{-3/2},$$

e

$$\psi_n''(x) = -\gamma^2\psi_n(x) + 2i\gamma\,e^{i\gamma x}n^{-3/2}\,\phi'(x/n) + e^{i\gamma\,x}n^{-5/2}\,\phi''(x)\,.$$

Desta forma, como ϕ' e ϕ'' estão em L^2 temos que

$$|\psi_n''+\gamma^2\psi_n| \leq 2\gamma n^{-3/2}|\phi'(x/n)|+n^{-5/2}|\phi''(x/n)\,| = 2\gamma n^{-1}\,|\phi'|+n^{-2}|\phi''|.$$

Assim, $|(-\triangle - \gamma^2 I)(\psi_n)|$ vai a zero quando $n \to \infty$.

Pode-se mostrar utilizando raciocínios apresentados em resultados anteriores que fracamente $\psi_n \to 0$.

Isto mostra que ψ_n é uma sequencia de Weyl para λ e $\mathbf{H}_0$.

O operador $\mathbf{H}_0 - \lambda I$ pode ser escrito como

$$\mathbf{H}_0 - \lambda\,I = \frac{1}{2m}\,(\mathcal{P} + \sqrt{2m\,\lambda}I)\,(\mathcal{P} - \sqrt{2m\,\lambda}I),$$

contanto que $\sqrt{2m\,\lambda}$ esteja bem definido. Ora, $\sqrt{2m\,\lambda}$ e $-\sqrt{2m\,\lambda}$ estão no resolvente de $\mathcal{P}$ se não forem números reais. Assim, $\mathbf{H}_0 - \lambda I$ seria inversível por ser a composta de inversíveis. Assim, se $\lambda < 0$, temos que $\lambda \in \rho(\mathbf{H}_0)$.

Concluímos assim que o espectro de $\mathbf{H}_0$ é $[0, \infty)$.

□

Um critério muito útil (ver prova em [305]) é o seguinte:

Teorema 2.22. *Se existem constantes* $a < 1$, *e,* b *real tal que para todo* $\psi \in D(\mathbf{H}_0)$

$$|\mathcal{V}(\psi)| \leq a\,|\mathbf{H}_0(\psi)| + b|\psi|,$$

então, $\mathbf{H}$ *é autoadjunto.*

Outro resultado importante:

Teorema 2.23. Seja $V(x)$ uma função contínua em $\mathbb{R}^d$ satisfazendo $V(x) \to 0$ com $|x| \to \infty$. Então

1. $\mathbf{H}$ é auto-adjunto
2. $\sigma_c(\mathbf{H}) = [0, \infty)$.

Demonstração. A demonstração de que $\mathbf{H}$ é autoadjunto pode ser obtida em [182]. Vamos mostrar o segundo item.

A demonstração segue de comparar o presente problema com o análogo para $-\mathbf{H}_0$. Sabemos que o espectro de $-\mathbf{H}_0$ é $[0, \infty)$. Seja $\lambda \geq 0$, e uma sequência ψ_n que é spreading para λ e $-\mathbf{H}_0$.

Ora,

$$|(\mathbf{H}-\lambda I)(\psi_n)|-|\mathcal{V}(\psi_n)| \leq |(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\mathbf{H}_0-\lambda I)(\psi_n)| \leq |(\mathbf{H}-\lambda I)(\psi_n)|+|\mathcal{V}(\psi_n)|.$$

O termo $|\mathcal{V}(\psi_n)|$ vai a zero com $n \to \infty$ porque ψ_n é spreading e $V(x)$ converge a zero quando $x \to \infty$.

Sendo assim o espectro contínuo de $\mathbf{H}$ e $-\mathbf{H}_0$ coincidem. Sendo assim, $\sigma_c(\mathbf{H}) = [0, \infty)$.

□

Vamos mostrar agora que se $[a, b]$ é um intervalo real, tal que esta contido no conjunto resolvente de um operador autoadjunto A, e, se ψ é um estado qualquer em $D(A)$, então, a probabilidade que $\psi(x)\overline{A(\psi)(x)}$ esteja em $[a, b]$ é nula. É neste sentido que se afirma que o observável toma apenas valores no espectro de A. Vamos elaborar sobre isto, mas antes necessitamos recordar alguns fatos.

Lembre que pelo Postulado 3, para cada observável clássico g corresponde um operador autoadjunto A^g, tal que, para todo ψ em $D(A)$ vale

$$\overline{g}_{|\psi|^2} = <\psi,\, A^g\,\psi>.$$

Vamos considerar o item 7) do Teorema Espectral

$$< f(A)(\psi), g(A)(\phi) >= \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)\, \overline{g(\lambda)}\, d < E(\lambda)(\psi), \phi >,$$

quando, $\phi = \psi$, $g = I_{[a,b]}$ e $f = 1$. Obtemos assim, para cada ψ

$$E_\psi(I_{[a,b]}(A)) =< \psi, I_{[a,b]}(A)(\psi) >= \int_{-\infty}^{\infty} I_{[a,b]}(\lambda)\, d < E(\lambda)(\psi), \psi >=$$

$$\int_a^b d < E(\lambda)(\psi), \psi >=< E(b)(\psi), \psi > - < E(a)(\psi), \psi > .$$

o item 9) do Teorema Espectral afirma que para todo $\psi \in D(A)$ vale

$$\int I_{(-\infty,b)}(x)\, |\psi(x)|^2\, dx = \int \psi(x)\, \overline{E(b)(\psi(x))}\, dx =< E(b)(\psi), \psi > .$$

Assim (vide Teorema 2.13),

$$E_\psi(I_{[a,b]}(A)) =< E(b)(\psi), \psi > - < E(a)(\psi), \psi >= \int I_{(a,b)}(x)\, |\psi(x)|^2\, dx.$$

2.3 Princípio do Mini-max

Nesta seção vamos mostrar entre outras coisas que o ground state ψ_0 minimiza

$$\lambda_0 = \int \quad \frac{\hbar^2}{2\,m} |\frac{d\,\psi}{dx}\,(x)\,|^2 \; + V(x)|\psi(x)|^2 \;\; dx,$$

entre os diversos ψ de norma 1.

Definição 2.7. Uma função $S : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ (não linear) é dita diferenciável em $\psi \in \mathcal{H}$, se ela é diferenciável para a estrutura de espaço normado de $\mathcal{H}$. A derivada (que é linear e assumida no momento limitada) será denotada por $S'(\psi) : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$.

Mais precisamente, para $\psi \in \mathcal{H}$, vale

$$\lim_{\Delta \to 0} \frac{|S(\psi + \Delta) - S(\psi) - S'(\psi)\,(\Delta)|}{|\Delta|} = 0.$$

Em geral se denomina de funcional (não linear) tal S.

Se $S(\psi) =< \psi, H\psi >$, para um operador linear autoadjunto limitado H, então, $S'(\psi_0) = 2\,H(\psi_0)$. Mais exatamente, temos que $S'(\psi_0)(\phi) =< H(\psi_0)\,,\phi >$.

De fato,

$$\lim_{\Delta\to 0} \frac{|S(\psi+\Delta) - S(\psi) - < 2\,H(\psi), \Delta > |}{|\Delta|} =$$

$$\lim_{\Delta\to 0} \frac{| < \psi+\Delta, H(\psi+\Delta) > - < \psi, H(\psi)) - < 2\,H(\psi), \Delta > |}{|\Delta|} = 0.$$

Se $C(\psi) =< \psi, \psi >$, então, $C'(\psi_0) = 2\psi_0$. Ou seja, $C'(\psi_0)(\phi) =< \phi, 2\,\psi_0 >$. Isto segue da afirmação anterior tomando $H = I$.

Sejam S, C funcionais diferenciavéis em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$.

Seja

$$M = \{\phi \in \mathcal{H} | C(\phi) = 0\}$$

uma superfície de nível. Seu espaço linear tangente em $\psi \in M$ é dado por

$$T_\phi M = \{\xi | \langle C'(\phi), \xi\rangle = 0\}$$

Dado o caminho $\phi : (a, b) \to \mathcal{H}$, onde $\mathcal{H}$ é um espaço de Hilbert, dizemos que ele é diferenciável em t_0 se existe um operador $L : \mathbb{R} \to \mathcal{H}$, tal que

$$\lim_{\Delta\to 0} \frac{|\phi(t_0+\Delta) - \phi(t_0) - L\,(\Delta)|}{|\Delta|} = 0.$$

Como L é linear temos que $L(\Delta) = \Delta\, h$, onde $h \in \mathcal{H}$. Denotamos tal h por $\dot\phi(t_0)$.

O caminho é diferenciável se é diferenciável em todo ponto t_0. O caminho é de classe C^1 se $t \to \dot\phi(t_0)$ é uma função continua.

Teorema 2.24. *(Multiplicadores de Lagrange) Sejam S, C funcionais diferenciáveis em um espaço de Hilbert X. Suponha que $\bar\phi$ é um mínimo local de S sujeito a restrição $C(\phi) = 0$,i.e., $\bar\phi$ é um mínimo local de S no espaço M, e $C'(\bar\phi) \neq 0$. Então $\bar\phi$ é um ponto crítico do funcional $S - \lambda C$ em X para algum $\lambda \in \mathbb{R}$. Ou seja, $\bar\phi$ satisfaz*

$$S'(\bar\phi) = \lambda C'(\bar\phi) \quad e \quad C(\bar\phi) = 0$$

Demonstração. Se $\bar{\phi}$ é ponto crítico para S em M, i.e., $S'(\bar{\phi}) = 0$ em $T_{\bar{\phi}}(M)$, então, para todo ξ, tal que, $\langle \xi, C'(\bar{\phi})\rangle = 0$, temos que $\langle \xi, S'(\bar{\phi})\rangle = 0$. Logo $S'(\bar{\phi})$ e $C'(\bar{\phi})$ são colineares, pois caso contrário podemos escrever $S'(\bar{\phi}) = aC'(\bar{\phi}) + u$, com $\langle u, C'(\bar{\phi})\rangle = 0$. E, assim, $\langle u, S'(\bar{\phi})\rangle = \langle u, aC'(\bar{\phi})\rangle + \langle u, u\rangle$, o que implicaria $\|u\|^2 = 0$. Logo, concluímos que $S'(\bar{\phi}) = \lambda C'(\bar{\phi})$.

Para provar que se $\xi \in T_\phi(M)$ então $S'(\phi)(\xi) = 0$ basta considerar a restrição de C e S ao plano geradopor $C'(\phi)$ e ξ e usar o fato que estamos em dimensão dois.

□

Como exemplo considere S agindo na restrição ao conjunto $M = \{\psi | < \psi, \psi >= 1\}$. Neste caso o mínimo $\overline{\phi}$ satisfaz $S'(\overline{\phi}) = 2\lambda\overline{\phi}$, para algum λ.

Teorema 2.25. *Seja H autoadjunto e $S(\psi) := \langle \psi, H\psi\rangle$, para $\psi \in D(H)$, com $\|\psi\| = 1$. Então $\inf \sigma(H) = \inf S$. Ainda, $\lambda := \inf \sigma(H)$ é um autovalor de H, se e somente se, existe um minimizante para $S(\psi)$, entre as $\psi \in D(H)$ tais que $\|\psi\| = 1$. Além disto, no caso em que $\mathbf{H}$ é limitado, $\psi \in D(H)$ é crítico para $S(\psi) := \langle \psi, H\psi\rangle$, se e só se, ψ é uma autofunção.*

Demonstração. Seja $\alpha = \inf \sigma(\mathbf{H})$. Se $\alpha = -\infty$ nada se tem que provar.

Suponha $\alpha \in \mathbb{R}$ e seja $\psi \in \mathcal{D}(\mathbf{H})$ tal que $|\psi| = 1$.

Enão pelo Teorema 2.1 (5) temos que

$$\int \lambda\, d < E(\lambda)(\psi), \psi > = \int_\alpha^\infty \lambda\, d < E(\lambda)(\psi), \psi >,$$

porque como $(-\infty, \alpha)$ é disjunto de $\sigma(H)$ então $E(\lambda)$ é constante em $(-\infty, \alpha)$ e igual a 0 (pelo item (3) do mesmo teorema).

Assim,

$$S(\psi) = < \psi, \mathbf{H}(\psi) > = \int \lambda\, \mathbf{d} < \mathbf{E}(\lambda)(\psi), \psi > \geq$$

$$\alpha \int_\alpha^\infty d < E(\lambda)(\psi), \psi >,$$

porque pelo Teorema 2.1 (1) tempos que $< E(\lambda)(\psi), \psi >$ é monótona crescente.

Temos ainda que

$$\int_{\alpha}^{\infty} d < E(\lambda)(\psi), \psi > = \int d < E(\lambda)(\psi), \psi >= 1.$$

Desta forma

$$S(\psi) \; = < \psi, \mathbf{H}(\psi) > \geq \; \inf \; \sigma(\mathbf{H})$$

para toda ψ tal que $|\psi| = 1$.

Pela observação 1 após o Teorema 2.9 temos qe se $z \in \mathbb{R}$ é tal que $z < \inf S$ então $z \notin \sigma(H)$. Portanto $\inf S \leq \inf \sigma(H)$. Seja agora $\lambda := \inf \sigma(H)$. Para a outra desigualdade se usa o teorema espectral. De fato, temos que $\langle \psi, H\psi \rangle \geq \lambda \|\psi\|^2$, para toda $\psi \in D(H)$, logo $\inf S \geq \lambda = \inf \sigma(H)$, e, assim $\inf S = \inf \sigma(H)$.

Se $\lambda = \inf \sigma(H)$ é um autovalor de H, com autovetor normalizado ψ_0, então

$$S(\psi_0) = \langle \psi_0, H\psi_0 \rangle = \lambda = \inf S.$$

Assim, ψ_0 é minimizante para S sujeito ao vínculo.

Por outro lado se ψ_0 é um mínimo local de S entre $\psi \in D(H)$, tais que, $C(\psi) = \|\psi\|^2 = 1$, então, $S'(\psi_0) = 2\,H(\psi_0)$. Assim, pelo teorema dos multiplicadores de Lagrange, $2\,H(\psi_0) = \lambda\, 2C'(\psi_0) = \lambda\, 2\,\psi_0$, para algum λ. Assim, ψ_0 é autovetor de H.

Ainda $S(\psi_0) = \langle \psi_0, H\psi_0 \rangle = \lambda \|\psi_0\|^2 = \lambda$. Como $S(\psi_0) = \inf S = \inf \sigma(H)$ concluimos que o λ (oriundo dos multiplicador de Lagrange) é um autovalor de H.

A partir da expressão acima $\psi \in D(H)$ é crítico para $S(\psi) := \langle \psi, H\psi \rangle$, se e só se, é uma autofunção.

Observamos que se pode mostrar uma resultado análogo sem requerer a diferenciabilidade de S.

Isto segue da seguinte afirmação que não será demonstrada: seja $A : \mathcal{D}(A) \to \mathcal{H}$ autoadjunto e $S : \mathcal{D}(A) \to \mathbb{R}$ dada por $S(\psi) \; = < \psi, A(\psi) >$, onde $\psi \in \mathcal{D}(A)$. Seja, $M = \{\psi \in \mathcal{D}(A) \,|\, |\psi| = 1\}$. Se ψ_0 for mínimo local para S restrito a M então ψ_0 é um autovetor de A.

□

O resultado acima pode ser sumarizado pelo assim chamado Princípio Variacional de Ritz. Para $\psi \in D(H)$, temos que $< \psi, H(\psi) > \geq \lambda = \inf \sigma(H)$. A igualdade ocorre, se e só se, $H(\psi) = \lambda\, \psi$.

Estamos acima minimizando

$$< \psi, [-\frac{\hbar^2}{2\,m} \triangle + \mathcal{V}]\psi >= \int -(\,\overline{\psi}(x)\frac{\hbar^2}{2\,m} \triangle(\psi)\,)(x) + V(x)|\psi(x)|^2\, dx$$

entre os diversos ψ de norma 1.

No caso periódico unidimensional $V : [0,1] \to \mathbb{R}$ observe que

$$-\int \psi(x)\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{d^2\,\psi}{dx^2}\,(x)\,dx = \int \frac{\hbar^2}{2\,m}\,|\frac{d\,\psi}{dx}\,(x)\,|^2\,dx.$$

Assim, podemos afirmar alternativamente que no Teorema acima estamos minimizando

$$\int \quad \frac{\hbar^2}{2\,m}\,|\frac{d\,\psi}{dx}\,(x)\,|^2\; + V(x)|\psi(x)|^2 \;\; dx,$$

entre os diversos ψ de norma 1.

No próximo teorema só nos interessa o caso em que $\sigma(A)$ é limitado inferiormente.

Teorema 2.26. *O operador auto-adjunto A possui ao menos n auto-valores (contando multiplicidade) menores do que $\inf \sigma_c(A)$, se e só se, $\lambda_n < \inf \sigma_c(A)$, onde*

$$\lambda_n = \inf_{\{F\subset D(A)|dimF=n\}} \max_{\{\psi\in F||\psi|=1\}} \langle\psi, A\psi\rangle.$$

Demonstração. Vamos iniciar pela prova de uma das implicações afirmadas pelo Teorema. Tome

$$V_n = span\{\phi_1, ..., \phi_n\}$$

autovetores com $A\phi_i = \lambda_i\phi_i$ e $\lambda_1 \leq ... \leq \lambda_n$. Desse modo,

$$\max_{\{\psi\in V_n\ |\ |\psi|=1\}} \langle\psi, A\psi\rangle = \max_{\{\sum_{j=1}^n |\alpha_j|^2=1\}} \sum_{j=1}^n |\alpha_j|^2\lambda_j = \lambda_n.$$

Logo,

$$\lambda_n \geq \inf_{\{F\subset D(A)\ |dimF=n\}} \max_{\{\psi\in F||\psi|=1\}} \langle\psi, A\psi\rangle$$

Agora suponha, por absurdo, que

$$\lambda_n > \inf_{\{F\subset D(A)\ |dimF=n\}} \max_{\{\psi\in F||\psi|=1\}} \langle\psi, A\psi\rangle,$$

ou seja, suponha que existe $W \neq V_n$ tal que $\lambda_n > \max_{\{\psi\in W||\psi|=1\}}\langle\psi, A\psi\rangle$. Então, existe $\psi_0 \in W - V_n$ com

$$\max_{\{\psi\in W||\psi|=1\}} \langle\psi, A\psi\rangle = \langle\psi_0, A\psi_0\rangle.$$

Definindo $S(\psi) = \langle\psi, A\psi\rangle$, ψ_0 é máximo de S (restrito a $\{\psi \in W : |\psi| = 1\}$) e satisfaz a equação do Teorema 2, $S'(\psi_0) = 2\lambda\psi_0$. Como $S'(\psi_0) = 2A\psi_0$, temos que $A\psi_0 = \lambda\psi_0$. Portanto, ψ_0 é autovetor com autovalor $\lambda = \max_{\{\psi\in W||\psi|=1\}}\langle\psi, A\psi\rangle$
$< \lambda_n$. Assim, $\psi_0 \in V_n$, o que contradiz a suposição $\psi_0 \in W - V_n$. Logo,

$$\lambda_n = \inf_{\{F\subset D(A)\ |dimF=n\}} \max_{\{\psi\in F||\psi|=1\}} \langle\psi, A\psi\rangle.$$

Vamos agora provar a outra implicação por indução em n. Para $n = 1$, defina $\lambda' := \inf_{|\psi|=1}\langle\psi, A\psi\rangle$ e, pelo Teorema 3, $\lambda' = \lambda_1$ é autovalor de A. Agora, por hipótese de indução, o operador A tem $n - 1$ autovalores $\lambda_1 \leq ... \leq \lambda_{n-1}$. Vamos mostrar que A possui n autovalores. Sejam $\phi_1, ..., \phi_{n-1}$ autovetores de A associados a $\lambda_1, ..., \lambda_{n-1}$ e $V_{n-1} := span\{\phi_1, ..., \phi_{n-1}\}$.

Sabemos que

$$\inf_{\{\psi\in V_{n-1}^{\perp}\cap D(A)|\ |\psi|=1\}} \langle\psi, A\psi\rangle = \inf\{\sigma(A) - \{\lambda_1, ..., \lambda_{n-1}\}\}$$

Por outro lado, dado F um subespaço n-dimensional de $D(A)$ então existe $\phi \in F \cap V_{n-1}^{\perp}$ com $|\phi| = 1$. Assim, temos que

$$\langle\phi, A\phi\rangle \geq \inf_{\{\psi\in V_{n-1}^{\perp}\cap D(A)|\ |\psi|=1\}} \langle\psi, A\psi\rangle.$$

Então,

$$\max_{\{\psi\in F||\psi|=1\}}\langle\psi,A\psi\rangle \geq \langle\phi,A\phi\rangle \geq \inf_{\{\psi\in V_{n-1}^{\perp}\cap D(A)|\ |\psi|=1\}}\langle\psi,A\psi\rangle$$

Temos que pela definição de $\lambda_n$do enunciado do Teorema,

$$\lambda_n \geq \inf_{\{\psi\in V_{n-1}^{\perp}\cap D(A)|\ |\psi|=1\}}\langle\psi,A\psi\rangle.$$

Por hipótese, $\lambda_n < \inf\sigma_c(A)$, logo

$$\alpha_n := \inf\{\sigma(A)-\{\lambda_1,...,\lambda_{n-1}\}\} = \inf_{\{\psi\in V_{n-1}^{\perp}\cap D(A)|\ |\psi|=1\}}\langle\psi,A\psi\rangle \leq \lambda_n < \inf\sigma_c(A).$$

Desse modo, pelo Teorema anterior, α_n é o n-ésimo autovalor de A pois é o $\inf\sigma(A|_{V_{n-1}^{\perp}})$. Sendo $\alpha_n \leq \lambda_n$, vamos mostrar que $\lambda_n \leq \alpha_n$. Como α_n é autovalor, sejam ϕ_n o autovetor associado e $V_n = span\{\phi_1,...,\phi_n\}$. Assim,

$$\lambda_n = \inf_{\{F\subset D(A)\ |dimF=n\}}\max_{\{\psi\in F||\psi|=1\}}\langle\psi,A\psi\rangle \leq \max_{\{\psi\in V_n||\psi|=1\}}\langle\psi,A\psi\rangle = \alpha_n.$$

Portanto, $\lambda_n = \alpha_n$ e A tem no mínimo n autovalores menores que $\inf\sigma_c(A)$ dados por

$$\lambda_j = \inf_{\{F\subset D(A)|dimF=j\}}\max_{\{\psi\in F||\psi|=1\}}\langle\psi,A\psi\rangle,\ \text{com } j=1,...,n$$

$\square$

2.4 Integral de uma curva tomando valores em operadores

Dado um operador limitado A considere uma função $f:\mathbb{C}\to\mathbb{C}$ analítica em um disco de raio R com centro na origem, $\{\lambda\in\mathbb{C}\mid|\lambda|<R\}$, com $R>\|A\|$. Está bem definida a expansão $f(\lambda)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\lambda^n$. Definimos o operador $f(A)$ pela série absolutamente convergente

$$f(A)=\sum_{n=0}^{\infty}a_nA^n.$$

Definição 2.8. Dizemos que uma função genérica de A, dada por $g(A)$, é analitica (em A) se pode ser escrita como série de potências em A (para algum fixo R a expressão vale para todo A tal que $|A| < R$).

Se A for auto-adjunto e $Im\,(z) > 0$, então, o operador resolvente $(A - zI)^{-1}$ é limitado e pode ser escrito série de potencias

$$(A - zI)^{-1} = -\frac{1}{z}\sum_{j=0}^{\infty} z^{-j} A^j$$

é conhecida como série de Neumann.

A série sempre converge se $||A|| < 2$.

Podemos também reobter o operador $f\,(A)$, quando f é uma função analítica em uma vizinhança de $\sigma\,(A)$, pela integral (ver Teorema 2.27 a seguir)

$$f\,(A) = \frac{1}{2\pi i}\oint_{\Gamma} f\,(z)\,(A - zI)^{-1}\,dz, \qquad (*)$$

onde Γ é um caminho fechado em $\mathbb{C}$ circulando o conjunto $\sigma\,(A) \subset \mathbb{R} \subset \mathbb{C}$ **no sentido horário** [77], $\gamma : [a, b] \to \mathbb{C}$, $\Gamma(a) = \Gamma(b)$..

Uma exposição abrangente e detalhada dos tópicos cobertos nesta seção pode encontrada em [63] [101] [100].

Existem resultados matemáticos que nos asseguram que (sob certas condições) dada uma familia de operadores $B(\gamma(t))$, onde $\gamma(t) \in \mathbb{C}$, $t \in [0, 1]$, descreve um curva parametrizada γ no plano complexo, esta bem definida a integral de caminho, ou seja, existe $\int B(\gamma(t))\,dt = C$, onde C é um operador (ver [101]). Em resumo, existe a integral de uma curva tomado valores em operadores, da mesma forma como existe tal conceito para uma curva tomado valores no $\mathbb{R}^n$. Ao fim desta seção vamos apresentar os detalhes de tais procedimentos.

Seja $\mathcal{H}$ o espaço dos operadores limitados agindo em L^2. Ele é um espaço de Hilbert para o produto interno $< A, B >=$ Tra ($A\ B^*$).

Assumimos que curva $\Gamma : [a, b] \to \mathbb{C}$ acima é de classe C^1. Observe que neste caso $\dot{\Gamma}(t_0) \in \mathbb{C}$.

Ainda, dado $B : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, por definição

$$\frac{1}{2\pi i}\oint_{\Gamma} B(z)dz = \frac{1}{2\pi i}\int_a^b B(\Gamma(t))\,\dot{\Gamma}(t)\,dt.$$

Observe que para cada t temos que $\phi(t) = B(\Gamma(t))\,\dot\Gamma(t)$ é uma curva no espaço dos operadores. Ao fim desta seção (ver escólio) vamos apresentar os detalhes da definição de tal integral.

Acima afirmamos que para uma curva Γ fechada (ou seja, $\Gamma(0) = \Gamma(1)$), tal que dá uma volta completa englobando todo o espectro de A, vale que $\frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma f(z)\,(A - zI)^{-1}\,dz = f(A)$.

Uma ótima referencia geral para o tópico em análise é [101] seção VII. 9 Theorem 4 e [188].

De forma preliminar, é mais fácil entender tal equação da seguinte maneira: $\forall\phi,\ \psi \in \mathcal{H}$,

$$\langle \psi, f(A)(\phi)\rangle = \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma f(z)\left\langle \psi, (A - zI)^{-1}\phi\right\rangle dz$$

determina $f(A)$. De fato, conforme seção 0, se para ϕ fixo, sabemos todos os valores $< \psi, f(A)(\phi) >$, para todas as ψ, então identificamos de maneira única o elemento $f(A)(\phi)$.

O resultado

$$f(A) = \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma f(z)\,(A - zI)^{-1}\,dz$$

é bastante natural. Vamos analisar primeiro o caso de **dimensão finita**. Suponha que A seja uma matriz finita e **diagonal** com autovalores λ_j, $j = 1, 2, .., n$. Então $(A - zI)^{-1}$ é a matriz diagonal com entradas $\frac{1}{\lambda_j - z}$, $j = 1, 2, .., n$. A integração acima resulta na integração em cada entrada da matriz.

Lembre que se $g(t) = (g_1(t), g_2(t), ..., g_n(t))$, $g : [a, b] \to \mathbb{R}^n$, então, por definição

$$\int_a^b g(t)\,dt = (\int_a^b g_1(t)\,dt, \int_a^b g_2(t)\,dt, ..., \int_a^b g_n(t)\,dt).$$

Suponha primeiro $f(z) = z$. Como A é diagonal, pela formula integral de Cauchy (ver [77]), se o caminho Γ contornar todos autovalores, então $\frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma z\,(A - zI)^{-1}\,dz$ vai resultar na matriz diagonal que tem λ_j, $j = 1, 2, .., n$ na diagonal ou seja, a matriz A.

Pela formula integral de Cauchy, se o caminho Γ contornar apenas os autovalores λ_3 e λ_4, então $\frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma z\,(A - zI)^{-1}\,dz$ vai resultar numa

matriz diagonal que tem zeros na diagonal menos nas entradas 3 e 4 onde tem os valores respectivamente λ_3 e λ_4

Suponha agora $f(z) = z^3$. Pela formula integral de Cauchy (ver [77]), se o caminho Γ contornar todos autovalores, então $\frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma z^3\,(A - zI)^{-1}\,dz$ vai resultar na matriz diagonal que tem λ_j^3, $j = 1, 2, .., n$ na diagonal ou seja, a matriz A^3.

Se A é diagonal ef for um polinômio resulta d um raciocínio semelhante que $f(A) = \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma f(z)\,(A - zI)^{-1}\,dz$.

Sabemos que se Γ desse apenas uma volta em torno de λ_j, j fixo, então pela fórmula integral de Cauchy

$$\frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma f(z)(\lambda_j - z)^{-1} dz = f(\lambda_j).$$

Assim, neste caso $\frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma f(z)\,(A - zI)^{-1}\,dz$ é a matriz diagonal que tem todas entradas na diagonal nulas menos a j-ésima que teria o valor $f(\lambda_j)$.

Se Γ dá uma volta em torno de todos os aultovalores λ_j, $j = 1, 2.., n$, resulta pela fórmula integral de Cauchy que a integral acima determina uma matriz é diagonal com entradas $f(\lambda_i)$, $j = 1, 2, .., n$. Esta resulta ser exatamente $f(A)$ neste caso.

Se A **não é diagonal**, mas é diagonalizável, isto é , existe C tal que $C\,D\,C^{-1}$ e D é diagonal diagonal, então, a prova do resultado segue do raciocínio acima. Observe que para $k \in \mathbb{N}$, vale $A^k = C\,D^k\,C^{-1}$.

A generalização para o caso da matriz ser diagonalizável sai do fato que vale

$$\frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma f(z)\,(A - zI)^{-1}\,dz = \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma f(z)\;C\;(D - zI)^{-1}\;C^{-1} dz =$$

$$C\,[\,\frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma f(z)\;(D - zI)^{-1}\;dz\,]\,C^{-1}.$$

Note também que $f(A) = C\,f(D)\,C^{-1}$.

Como todo operador autoadjunto em dimensão finita é diagonalizável o raciocínio acima da conta da afirmação no caso geral enunciado anteriormente (expressão (*) após a definição 2.8)

Fica fácil perceber agora que se A é autoadjunto e se Γ for um caminho fechado em $\mathbb{C}$ circulando apenas alguns autovalores do conjunto $\sigma(A)$, então

$$B = \frac{1}{2\pi\,i}\oint_\Gamma z\;(A - zI)^{-1}\,dz$$

vai determinar a ação de A restrita ao subespaço gerado pelos autovetores correspondentes ao autovalores circulados por Γ.

Note que se Γ desse apenas uma volta em torno de λ_j, então pela fórmula integral de Cauchy

$$\frac{1}{2\pi i}\oint_{\Gamma}(\lambda_j - z)^{-1}dz = 1.$$

Finalmente, se A é autoadjunto diagonal e se Γ for um caminho fechado em $\mathbb{C}$ circulando apenas alguns autovalores do conjunto $\sigma(A)$, então

$$L = \frac{1}{2\pi\, i}\oint_{\Gamma}\,(A - zI)^{-1}\,dz$$

vai determinar projeção no subespaço gerado pelos autovetores correspondentes ao autovalores circulados por Γ. Isto porque se A é diagonal então vai aparecer 1 ou 0 na diagonal da matriz A no caso de Γ envolver o autovalor correspondente ou não.

Se A não é diagonal, mas, existe B tal que $B\,A\,B^{-1}$ é diagonal o resultado segue da mesma forma.

Voltemos agora ao caso de dimensão infinita.

Teorema 2.27. *Seja $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$, com raio de convergência R e a a série absolutamente convergente $f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n A^n$ para A limitado e $|A| < R$.*

Suponha que f é uma função analítica em uma vizinhança de $\sigma(A)$, então é limitado e está bem definido

$$f(A) = \frac{1}{2\pi i}\oint_{\Gamma} f(z)\,(A - zI)^{-1}\,dz,$$

onde Γ é um caminho fechado em $\mathbb{C}$ circulando o conjunto $\sigma(A)$ no sentido horário. Assumimos que $\Gamma \cap \sigma(A) = \emptyset$.

Demonstração. para $z \in \Gamma$ temos que $(A - zI)^{-1}$ é limitado e pode ser escrito série de potencias

$$(A - zI)^{-1} = -\frac{1}{z}\sum_{j=0}^{\infty} z^{-j}A^j.$$

Como $||A|| < R$, então $\sigma(A)$ está contido no disco de raio R, o que assegura a convergencia absoluta da série.

Assim,

$$f(z)\,(A - zI)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n\,(A - zI)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n\,[-\frac{1}{z}\sum_{k=0}^{\infty} z^{-k} A^k].$$

Fixe o par ψ, ϕ de quadrado integrável. Temos que estimar o valor $< \psi, f(A)(\phi) >$.

Ora,

$$< \psi, f(z)\,(A - zI)^{-1}\,(\phi) >= \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n\,[-\frac{1}{z}\sum_{j=0}^{\infty} z^{-j}\ < \psi, A^j(\phi) >].$$

Ainda,

$$< \psi, f(A)(\phi) >= \sum_{j=0}^{\infty} a_n < \psi, A^n(\phi) > .$$

Vamos demonstrar o resultado no caso em que o operador A possui um conjunto ortonormal completo ψ_j, $j \in \mathbb{N}$, com respectivos autovalores λ_j, $j \in \mathbb{N}$.

Cada ψ se decompõe como $\sum_j c_j \psi_j$. Assim, basta mostrar que para cada j, k vale $< \psi_j, f(A)(\psi_k) >= \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma < \psi_j, f(z)\,(A - zI)^{-1}\,(\psi_k) >$.

Ora, $A^n(\psi_j) = \lambda_j^n$. Como os ψ_j são ortogonais assim, basta mostrar que para cada j vale

$$< \psi_j, f(A)(\psi_j) >= \frac{1}{2\pi i}\oint_\Gamma < \psi_j, f(z)\,(A - zI)^{-1}\,(\psi_j) > .$$

Observe que $<\ \psi_j, A^k(\psi_j)\ >= \overline{\lambda}_j^k$.

Da primeira expressão que calculamos segue que

$$< \psi_j, f(z)\,(A - zI)^{-1}\,(\psi_j) >=$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n\,[-\frac{1}{z}\sum_{k=0}^{\infty} z^{-k}\,\overline{\lambda}_j^k] = f(z)(-\frac{1}{z}\ \ \frac{1}{1 - z\,\overline{\lambda}_j}\ ) = f(z)\ \ \frac{1}{\overline{\lambda}_j - z}.$$

Da primeira expressão que calculamos segue que

$$< \psi_j, f(A)(\psi_j) >= \sum_{j=0}^{\infty} a_n < \psi_j, A^n(\psi_j) >= \sum_{j=0}^{\infty} a_n \overline{\lambda}_j^n = f(\overline{\lambda}_j).$$

O resultado segue então da formula integral de Cauchy [77].

□

Adaptando a prova acima se pode mostrar o seguinte: seja A operador autoadjunto e $\lambda_3, \lambda_4, \lambda_7 \in \mathbb{R} \subset \mathbb{C}$ autovalores de A. Seja uma curva γ fechada (ou seja, $\gamma(0) = \gamma(1)$) com imagem contida em $\mathbb{C}$, tal que dá uma volta completa englobando apenas os autovalores $\lambda_3, \lambda_4, \lambda_7$ (que estã contidos o espectro de A). Seja F o espaço gerado pelos correspondentes autovetores e P_F a projeção associada.

Então, vale que $\frac{1}{2\pi i} \oint_\Gamma f(z)\,(A - zI)^{-1}\, dz = P_F(\,f(A)\,)$.

Tomando $f(z) = z$ temos que a integral acima nos dá $P_F \circ A$.

O resultado descrito acima é muito útil quando se deseja considerar perturbações de potenciais V. Sob as hipóteses convenientes (ver teorema 2.18) o operador Hamiltoniano tem como espectro apenas autovalores isolados. Pergunta: será que o menor autovalor de $\mathbf{H} = \frac{\mathcal{P}^2}{2\,m} + \mathcal{V}$ varia de forma continua com a variação do potencial V? Para analisar tal problema se considera uma curva γ no plano complexo que envolve apenas o autovalor minimal. Mais precisamente, se pode considerar $\mathbf{H}$ (associado a potencial V) e um outro operador $\mathbf{H_1}$ (associado ao potencial V_1) e tal que V_1 está próximo de V. Agora, calculando a integral $\frac{1}{2\pi i} \oint_\Gamma z\,(\mathbf{H_1} - zI)^{-1}\, dz$ podemos ver que o operador resultante depende continuamente de V_1. Um pouco mais de esforço nos permite deduzir que o menor autovalor vai depender continuamente de V_1 perto do V inicial. Referimos o leitor a [188] para resultados gerais sobre este assunto.

Proposição 2.28. *Suponha que ψ tenha suporte compacto $[-R, R]$. Suponha ainda que f seja limite em n de $I_{[-R,R]}\, f_n$, $R > 0$ fixo, onde f_n são funções analíticas, e, g seja o observável clássico associado a A. Ou seja, $Q^g = A$. Então*

$$\int f(g(x))\, |\psi(x)|^2\, dx =< \psi, f(A)(\psi) > .$$

Demonstração. Pelo postulado 6 temos que para f_n analítica

$$\int f_n(g(x))\, |\psi(x)|^2\, dx =< \psi, f_n(A)(\psi) > .$$

Considere $h_n = I_{[-R,R]}\, f_n$, então pelo item 11 do teorema espectral temos que $h_n(A)$ é uma extensão de $I_{[-R,R]} \circ f_n(A)$.

Note que

$$\int f_n(g(x))\,|\psi(x)|^2\,dx = \int h_n(g(x))\,|\psi(x)|^2\,dx$$

Pelo item 10 do teorema espectral temos que para qualquer ψ vale $h_n(A)(\psi) \to f(A)(\psi)$. O resultado segue ao se tomar o limite em n na expressão acima.

□

Escólio:

Para simplificar vamos considerar a integral de uma função com domínio real e tomando valores em operadores limitados. O caso da integral quando o domínio está numa curva recai neste. Seguimos aqui o desenvolvimento descrito em [100].

Seja $\phi : [a,b] \to \mathcal{H}$. Dizemos que ela é uma step function se é constante em intervalos, isto é, da seguinte forma: existem $a = t_0 < t_1 < t_2 < ... < t_{n-1} < t_n = b$, $h_j \in \mathcal{H}$, $j = 0, ..., n-1$, tais que

$$\phi(t) = h_0 I_{[a,t_1]}(t) + \sum_{j=1}^{n-1} h_j I_{[t_j,t_{j+1}]}(t).$$

Denotamos $|\phi|_0 = \sup_{t\in[a,b]} |\phi(t)|$.

Por definição a integral de tal função ϕ é $I(\phi) = \sum_{j=0}^{n-1}(t_{j+1}-t_j)\,h_j \in \mathcal{H}$. Denotamos por $\mathcal{S}$ o conjunto de todas a step functions (n não está limitado). Assim obtivemos $I : \mathcal{S} \to \mathcal{H}$.

Note que para $\phi \in \mathcal{S}$

$$|I(\phi)| = |\sum_{j=0}^{n-1}(t_{j+1} - t_j)\,h_j| \leq$$

$$|h_0|(t_1 - a) + \sum_{j=1}^{n-1} |h_j|\,(t_{j+1} - t_j) \leq (b-a)|\phi|_0.$$

Seja agora $\phi : [a,b] \to \mathcal{H}$ contínua (assim uniformemente contínua conforme [223]). Fixada uma partição π de $[a,b]$ dada por $a = t_0 < t_1 < t_2 < ... < t_{n-1} < t_n = b$, considere a soma de Riemman

$$\phi_\pi(t) \,=\, \phi(t_0) I_{[t_0,t_1]}(t) + \sum_{j=1}^{n-1} \phi(t_j) I_{[t_j,t_{j+1}]}(t).$$

Note que independente da partição π temos que $|I(\phi_\pi)| \leq (b-a)|\phi|_0$.

Para cada $\epsilon > 0$ considere a família Π_ϵ de partições π tais que $\sup_{j=0,1,\ldots,n-1}(t_{j+1} - t_j) < \epsilon$.

Como ϕ é uniformemente contínua então a familia ϕ_π, onde π varre todas as partições finitas, é equicontínua e equilimitada (ver [223]).

Escolha agora uma ϕ_k, $k \in \mathbb{N}$, onde $\phi_k \in \Pi_{1/k}$. Da mesma forma ϕ_k, $k \in \mathbb{N}$, define uma família equicontínua e equilimitada.

Desta forma, pelo teorema de Arzela-Ascoli, existe uma subsequencia ϕ_{k_i}, $k_i \to \infty$, tal que existe o limite $I(\phi_{k_i})$ em $\mathcal{H}$, quando $k_i \to \infty$.

Vamos denotar por $\int_a^b \phi(t)\,dt \in \mathcal{H}$ tal limite. Como a função ϕ é equicontínua este limite não depende da sequencia ϕ_{k_i} $i \in \mathbb{N}$, nem mesmo da $\phi_k \in \Pi_{1/k}$, $k \in \mathbb{N}$ escolhida.

Fica assim definida a integral (de Riemann) de uma curva (função) tomando valores num espaço de Hilbert (assumindo que ϕ é contínua).

2.5 Produto Tensorial e Canais Quânticos

A parte inicial desta seção é baseada em [184] e em [214] onde sistemas de spin são analisados. Vamos considerar apenas a análise do problema em dimensão finita.

Alguns resultados sobre Canais Quânticos serão tratados ao fim desta seção. Um ótima exposição sobre canais quânticos pode ser obtida em [117], [285] (ver chapter 7 e appendix 11) ou em [18] e [17].

Vamos considerar um sistema quântico que consiste de uma partícula de spin 1/2 que pode apontar para cima ou para baixo. Estas opções seriam idenficadas por $\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$. Sistemas deste tipo aparecem na Computação Quântica [264].

Este sistema pode ser descrito em $\mathbb{C}^2$ e vamos denotar os geradores deste espaço de dimensão 2 por $v_1 = |+\frac{1}{2}\rangle$, e $v_2 = |-\frac{1}{2}\rangle$. Supomos que v_1, v_2 formam uma base ortonormal. Assim, os estados possíveis são vetores $\psi = (\psi_1, \psi_2) \in \mathbb{C}^2$, tais que $|\psi| = 1$, e, denotamos

$$\psi = \psi_1\, v_1 + \psi_2\, v_2 = \psi_1 \;\; |+\frac{1}{2}\rangle \,+\, \psi_2 \;\; |-\frac{1}{2}\rangle.$$

O leitor não deve se atrapalhar com a notação. Se deseja pode considerar que $(1,0) = v_1 = |+\frac{1}{2}\rangle$ e $(0,1) = v_2 = |-\frac{1}{2}\rangle$ (que define a base canônica do $\mathbb{C}^2$) sem problemas.

Se o sistema está no estado ψ, então existe uma probabilidade $|\psi_1|^2$ de ocorrer $|+\frac{1}{2}\rangle$ e uma probabilidade $|\psi_2|^2$ de ocorrer $|-\frac{1}{2}\rangle$.

Neste contexto, cada estado $\psi = (\psi_1, \psi_2) \in \mathbb{C}^2$ traz a potencialidade da ocorrência de $|+\frac{1}{2}\rangle$ e $|-\frac{1}{2}\rangle$ com as probabilidades correspondentes obtidas do procedimento acima. Desta forma, estamos trocando o espaço $\mathbb{R}^3$, (onde consideramos a quantizaçao do Hamiltoniano, ou seja o operador $\mathbf{H}$), anteriormente considerado, por um conjunto com dois elementos. Um operador autoadjunto A agindo sobre $\mathbb{C}^2$ vai desempenhar o papel do $\mathbf{H}$.

Consideramos agora um novo sistema de spin tipo partícula que pode ter três estados para cima, para baixo, ou nulo. Assim, ele pode ser descrito em $\mathbb{C}^3$ e uma base caracterizada por $w_1 = |+1\rangle$, $w_2 = |0\rangle$, $w_3 = |-1\rangle$. Supomos que w_1, w_2, w_3 formam uma base ortonormal.

Um estado, neste contexto, seria um elemento

$$\phi = \phi_1\, w_1 + \phi_2\, w_2 + \phi_3\, w_3 = \;\phi_1 \;\, |+1\rangle \;+ \phi_2 \;\, |0\rangle + \phi_3 \;\, |-1\rangle.$$

O descrito acima é tão somente escrever em linguagem de spins uma base do espaço $\mathbb{C}^3$.

Vamos agora analisar observações que envolvem os dois sistemas conjuntamente, ou seja, o sistema composto.

Assim, este novo sistema pode ser descrito por

$$\{|+\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle\} \text{ e } \{|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle\}.$$

Podemos pensar que temos um lattice com dois pontos e em um deles temos o sistema descrito por $\{|+\frac{1}{2}\rangle, |-\frac{1}{2}\rangle\}$ e no outro o sistema $\{|+1\rangle, |0\rangle, |-1\rangle\}$.

Um ponto fundamental a destacar aqui é que as probabilidades das distintas possibilidades se intereferem! O produto tensorial vai expressar de forma matemática simples esta propriedade.

Uma suposição física natural é assumir que o sistema composto inclui estados que assumem cada um dos valores descritos acima (ver Postulado abaixo). Então existem seis estados, que serão denotados por

$$(v_1, w_1), (v_1, w_2), (v_1, w_3), (v_2, w_1), (v_2, w_2), (v_2, w_3),$$

ou, escrito de outra forma, os novos estados do sistema composto seriam

$$|+\frac{1}{2}, +1\rangle,\ |+\frac{1}{2}, 0\rangle,\ |+\frac{1}{2}, -1\rangle,\ |-\frac{1}{2}, +1\rangle,\ |-\frac{1}{2}, 0\rangle,\ |-\frac{1}{2}, -1\rangle. \quad (2.1)$$

Estes deveriam ser os geradores de um novo espaço de Hilbert que descreve o sistema composto.

Como estamos considerando uma teoria quântica, esperamos que combinações lineares dos estados acima sejam permitidos. Então parece natural supor que o estado mais geral pode ser escrito na forma

$$|\psi\rangle = c_1|+\frac{1}{2}, +1\rangle + c_2|+\frac{1}{2}, 0\rangle + c_3|+\frac{1}{2}, -1\rangle + c_4|-\frac{1}{2}, +1\rangle + c_5|-\frac{1}{2}, 0\rangle, +c_6|-\frac{1}{2}, -1\rangle,$$

$c_i \in \mathbb{C}$, $i = 1, 2, ..., 6$, e portanto os vetores na equação (2.1) formam uma base para o espaço de Hilbert do sistema composto. Como temos seis vetores, o espaço é isomorfo a $\mathbb{C}^6$.

Note que o sistema natural a ser analisado não corresponde ao $\mathbb{C}^5$ que seria o produto cartesiano de $\mathbb{C}^2$ e $\mathbb{C}^3$. Necessitaremos do assim chamado produto tensorial para entender o problema.

Para um sistema composto em geral, a operação matemática relevante toma vetores ψ_1 e ψ_2 nos espaços de Hilbert $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$,de dimensão

m e n respectivamente, e os transforma em um vetor $\psi_1 \otimes \psi_2$ em um novo espaço de Hilbert $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, chamado **produto tensorial** de $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$, que tem dimensão mn. Vamos apresentar logo abaixo as definições formais. O espaço de estados quântico do sistema composto é, portanto, o produto tensorial dos espaços de estados quânticos dos subsistemas constituintes. No exemplo acima, o vetor $|+\frac{1}{2}, +1\rangle$ denota o produto tensorial $|+\frac{1}{2}\rangle \otimes |+1\rangle$. Em particular, temos que o produto tensorial $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$ é isomorfo a $\mathbb{C}^6$.

Se $|v_i\rangle$ e $|w_j\rangle$ são bases ortonormais para $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$, respectivamente, então $|v_i\rangle \otimes |w_j\rangle$ é uma base para $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Usaremos também as notações

$$|v\rangle|w\rangle\,,\ |v, w\rangle \text{ e } |vw\rangle$$

para denotar o produto $|v\rangle \otimes |w\rangle$. Por exemplo, se $\mathcal{H}$ é um espaço de Hilbert de dimensão 2 com vetores base $|0\rangle$ e $|1\rangle$, então

$$7\,|0\rangle \otimes |0\rangle + (3 + 4.5\,i)|1\rangle \otimes |1\rangle \in \mathcal{H} \otimes \mathcal{H}.$$

Denote $e_1 = (1, 0) = |0\rangle, e_2 = (0, 1) = |1\rangle$, a base canônica do $\mathbb{C}^2$.
Uma base de $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ seria

$$|0\rangle \otimes |0\rangle,\ |0\rangle \otimes |1\rangle,\ |1\rangle \otimes |0\rangle,\ |1\rangle \otimes |1\rangle.$$

Ou, alternativamente, escrito da forma

$$|0 \otimes 0\rangle,\ |0 \otimes 1\rangle,\ |1 \otimes 0\rangle,\ |1 \otimes 1\rangle,$$

ou, ainda,

$$|0\,0\rangle,\ |0\,1\rangle,\ |1\,0\rangle,\ |1\,1\rangle.$$

Agora definiremos formalmente o produto tensorial $V \otimes W$ (referimos o leitor para as seções 24 e 52 em [159] ou para seção 6 in [282] para maiores detalhes). Sejam V e W são espaços vetoriais, que iremos supor sempre sobre $\mathbb{C}$ e ainda que são de dimensão finita. A construção mais geral para módulos sobre anéis comutativos, que não precisaremos aqui, pode ser vista na seção XVI.1 [211] ou em [242].

Dados os espaços vetoriais V e W considere os pares (u, v) onde $u \in V$ e $w \in W$.

Seja $C(V, W)$ o subespaço gerado por todos os elementos da forma

$$\begin{gathered}(v_1 + v_2, w) - (v_1, w) - (v_2, w)\\ (v, w_1 + w_2) - (v, w_1) - (v, w_2)\\ (rv, w) - r(v, w)\\ (v, rw) - r(v, w)\end{gathered} \tag{2.2}$$

onde $v_i \in V$, $w_i \in W$ e $r \in \mathbb{R}$.

Agora definimos a relação de equivalencia $z \sim y$ se $z - y \in C(V, W)$. Como é usual, a partir desta relação $\sim$ se pode criar classes de equivalencia. Dados $v \in V$ e $w \in W$ a classe de (u, v) é denotada por $u \otimes w$.

O conjunto das classes é $V \otimes W$.

O objetivo de assumir a relação de equivalencia é que neste novo espaco vetorial quociente serão verdadeiras certas propriedades desejadas. As operações nas classes estarão bem definidas.

Um elemento $v \otimes w$ (uma classe de equivalência), $v \in V, w \in W$, no conjunto assim obtido $V \otimes W$, vai descrever o objeto matemático que buscamos.

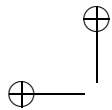
O objetivo de considerar a relação de equivalencia acima é a seguinte: neste contexto vai valer a seguinte propriedade: o produto tensorial é linear em cada entrada, ou seja, para todo $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $\psi, \phi \in V$ e $\xi \in W$,

$$(\alpha\psi + \beta\phi) \otimes \xi = (\alpha\psi) \otimes \xi + (\beta\phi) \otimes \xi,$$

e, ainda

$$\alpha(\psi \otimes \phi) = (\alpha\psi) \otimes \phi = \psi \otimes (\alpha\phi).$$

Se 0 denota o elemento neutro em V ou W, então $0 \otimes 0$ é o neutro neste novo espaço. Note que $0 \otimes v$, onde $v \in V$, tambem representa o elemento nulo $0 \otimes 0$. Isto porque para qualquer fixado $\lambda \in \mathbb{C}$, $\lambda \neq 1$, vale $0 \otimes v = (\lambda\, 0) \otimes v = \lambda(0 \otimes v)$, o que equivale a dizer que $(1 - \lambda)\,(0 \otimes v)$ é nulo. Logo, $\lambda = 1$ ou $0 \times v$ é nulo, e assim segue a afirmação.

Outra forma de entender a questão e a razão de se assumir a relação: $z \sim y$ se $z - y \in C(V, W)$

$(0, v)$ e $(0, 0)$ são equivalentes. De fato, dados w_1, w_2, temos que

$$(0, 0) - (0, v) = (0, -v) = (w_1 + w_2, v) - (w_1, v) - (w_2, v) \in C(V, W).$$

O **produto tensorial escrito em coordenadas** possui uma forma simples.

Por exemplo, o produto tensorial dos vetores $(2, 3) \in \mathbb{C}^2$ e $(4, 5) \in \mathbb{C}^2$ é

$$\begin{bmatrix} 2 \\ 3 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 4 \\ 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \times 4 \\ 2 \times 5 \\ 3 \times 4 \\ 3 \times 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 10 \\ 12 \\ 15 \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2.$$

Ou seja, se faz a multiplicação termo a termo no produto para obter o produto tensorial. Isto vale em geral.

Vamos agora elaborar sobre o que descrevemos brevemente acima.

Definição O **produto tensorial dos espaços vetoriais** V e W, denotado por $V \otimes W$ é o espaço

$$V \otimes W := \frac{V \times W}{C(V,W)}$$

Seja v_i, $i = 1, 2, .., n$, base ortogonal de $\mathbb{C}^n$ e w_j, $j = 1, 2, .., m$, base ortogonal de $\mathbb{C}^m$.

Um elemento genérico em $\mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^m$ é da forma

$$\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} a_{ij}(v_i \otimes w_j),$$

$a_{ij} \in \mathbb{C}$.

Por exemplo, o elemento genérico em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$ é dado

$$c_{11}(v_1 \otimes w_1) + c_{12}(v_1 \otimes w_2) + c_{13}(v_1 \otimes w_3) + c_{21}(v_2 \otimes w_1) +$$

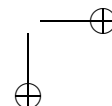
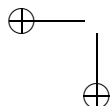
$$c_{22}(v_2 \otimes w_2) + c_{23}(v_2 \otimes w_3),$$

onde v_1, v_2 é base ortonormal de $\mathbb{C}^2$ e w_1, w_2, w_3 é base ortonormal de $\mathbb{C}^3$.

Observe que a dimensão de $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$ é seis enquanto que a dimensão de $\mathbb{C}^2 \times \mathbb{C}^3$ é cinco.

Antes de apresentar um formulação mais rigorosa da teoria vamos introduzir mais um postulado e explicar o papel que o produto tensorial desempenha no entendimento do fenômeno físico de sistemas quânticos compostos.

A ação de um Hamiltoniano no lattice finito quântico, no qual existem interferências entre as diferentes possibilidades, requer o uso do produto tensorial para o seu correto equacionamento.

Um sistema quântico é dito **composto** quando é formado por subsistemas quânticos. Uma ótima referencia neste tópico é a seção 4 do cap. IV de [282], [353] ou [249].

Vamos elaborar num exemplo o que descreveria o sistema composto. Suponha que estado ϕ em $\mathbb{C}^2$ seja dado como

$$\phi = a_1 v_1 + a_2 v_2,$$

e o estado ψ em $\mathbb{C}^3$ seja dado como

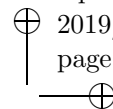
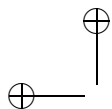
$$\psi = \alpha_a w_a + \alpha_b w_b + \alpha_c w_c.$$

Se considerarmos o estado composto obtido a partir de ϕ e ψ, em que podem ocorrer (ou não) interferencias das distintas probabilidades de medição, devemos descrever um novo estado φ em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$.

Por exemplo, um mecanismo no laboratório A consegue aproximar e por em possível interferencia os estados ϕ e ψ "produzindo"assim $\phi \otimes \psi$. A informação dos possíveis eventos 1 e 2 é enviada por fibra ótica para o laboratório B situado na cidade x e a informação dos possíveis eventos a, b, c é enviada por outra fibra ótica para o laboratório C situado na cidade y. A eventual interferencia (na verdade neste caso não vai ocorrer em termos de probabilidade de medição como veremos) inicial de ϕ e ψ caraterizada por $\phi \otimes \psi$ se mantém.

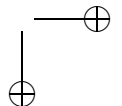
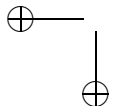
Seja estado composto $\varphi = \phi \otimes \psi$, que pode ser expresso na forma

$$c_{1a}(v_1 \otimes w_a) + c_{1b}(v_1 \otimes w_b) + c_{1c}(v_1 \otimes w_c) + c_{2a}(v_2 \otimes w_a) + c_{2b}(v_2 \otimes w_b) + c_{2c}(v_2 \otimes w_c),$$

onde $c_{j\,k} = a_j\, \alpha_k$, onde $j = 1, 2$ e $k = a, b, c$.

Então, por exemplo, a probabilidade de ocorrer $(v_2 \otimes w_a)$ é $|c_{2\,a}|^2$. Esta afirmação descreve o que ocorre de fato no fenômeno físico e está de acordo com o próximo postulado.

Mais explicitamente: suponha que no Laboratório B se pode medir os spins $1, 2$ e que no laboratório C se pode medir os spins a, b, c. Os dois sistemas (um em cada laboratório) poderiam (eventualmente) se interferir - o que chamaremos em seguida de sistema composto - e a probabildide de medir simultaneamente 2 e a seria dada por $|c_{2,a}|^2$.

Note que no laboratório A antes de considerar o sistema composto a probabilidade de 1 no estado ϕ seria $|a_1|^2$ e de 2 seria $|a_2|^2$. Ou seja, medições resultando 2 dariam frequencia $|a_2|^2$.

Ainda, no laboratório A antes de considerar o sistema composto a probabilidade de a no estado ψ seria $|\alpha_a|^2$, de b seria $|\alpha_b|^2$ de c seria $|\alpha_c|^2$. Ou seja, medições resultando a dariam frequencia $|\alpha_a|^2$.

No sistema composto descrito acima $\varphi = \phi \otimes \psi$ e produzido no laboratório A, em função da expressão do **produto tensorial em coordenadas** (ver acima), as medições que resultassem no par ordenado $(2, a)$ teriam frequencia $|a_2|^2 \, |\alpha_a|^2 = |c_{2a}|^2$. Num certo sentido isto poderia significar no nosso **caso particular** simplificado uma certa forma de independência (este exemplo corresponde a não emaranhamento). Um caso mais complexo será tratado em breve (estado emaranhado) onde tal "independencia" não irá ocorrer.

Existe uma estrutura natural de produto interno em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$: dados $(a_1 \otimes a_2)$ e $(b_1 \otimes b_2)$ em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$ definimos

$$< \, (a_1 \otimes a_2) \, , \, (b_1 \otimes b_2) \, > = < a_1, b_1 > < a_2, b_2 > .$$

A operação acima deve ser estendida linearmente em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$.

Desta forma podemos definir uma norma $|x| = \sqrt{< x, x >}$, para $x \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$, o que torna $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$ um espaço de Hilbert. Sendo assim $|\phi \otimes \psi| = |\phi| \, |\psi|$. Desta forma, se $|\phi| = 1$ e $|\psi| = 1$ então $|\phi \otimes \psi| = 1$.

No caso geral $\mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^m$ da mesma forma dados $(a_1 \otimes a_2)$ e $(b_1 \otimes b_2)$ em $\mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$ definimos

$$< \, (a_1 \otimes a_2) \, , \, (b_1 \otimes b_2) \, > = < a_1, b_1 > < a_2, b_2 > .$$

Note que se ϕ_1, ϕ_2 é base ortonormal de $\mathbb{C}^2$ e ψ_1, ψ_2 também é base ortonormal de $\mathbb{C}^2$ então

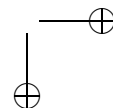
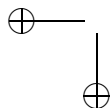
$$\phi_1 \otimes \psi_1 \ , \phi_1 \otimes \psi_2 \ , \phi_2 \otimes \psi_1 \ , \phi_2 \otimes \psi_2 \tag{2.3}$$

é base ortonormal em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ segundo o produto interno acima definido.

Considere os operadores lineares $A_1 : \mathbb{C}^m \to \mathbb{C}^m$ e $A_2 : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$, Então, por definição, o operador $A_1 \otimes A_2$ age em $\mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$ da seguinte forma: dado $a_1 \otimes a_2$ então

$$(A_1 \otimes A_2) \, (a_1 \otimes a_2) = A_1(a_1) \otimes A_2(a_2).$$

Da mesma forma se $x = \sum_j a_1^j \otimes a_2^j \in \mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$, então, $A_1 \otimes A_2(x) = \sum_j (A_1 \otimes A_2)(a_1^j \otimes a_2^j)$.

$(A_1 \otimes A_2)$ como definido acima esta bem definido por respeitar a estrutura de classes de $\mathbb{C}^m \otimes \mathbb{C}^n$

Usando o produto interno descrito acima podemos definir o conceito de dual. O operador dual de $(A_1 \otimes A_2)$ é o operador $(B_1 \otimes B_2)$ tal que para quaisquer $(a_1 \otimes a_2)$ e $(b_1 \otimes b_2)$ vale

$$< \, (A_1 \otimes A_2)(a_1 \otimes a_2) \, , \, (b_1 \otimes b_2) \, >=< \, (a_1 \otimes a_2) \, , \, (B_1 \otimes B_2) \, (b_1 \otimes b_2) \, > .$$

É fácil ver que o dual de $(A_1 \otimes A_2)$ é $(A_1^* \otimes A_2^*)$.

Se A_1 e A_2 forem autoadjuntos, então $A_1 \otimes A_2$ é autoadjunto. Ainda, se A_1 e A_2 forem positivos, então $A_1 \otimes A_2$ é positivo e assim por diante.

Por definição a composta do operador $A_1 \otimes A_2$ com $B_1 \otimes B_2$ age em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^3$ da seguinte forma: dado $a_1 \otimes a_2$ então

$$(A_1 \otimes A_2) \circ (B_1 \otimes B_2) \; (a_1 \otimes a_2) = (A_1 \circ B_1)(a_1) \otimes (A_2 \circ B_2)(a_2).$$

O elemento neutro para a operação de composição é $I \otimes I$. Se A_1 e A_2 são inversíveis então $(A_1^{-1} \otimes A_2^{-1})$ é o inverso de $(A_1 \otimes A_2)$.

Assim, se U_1 e U_2 são unitários então $(U_1 \otimes U_2)$ é unitário.

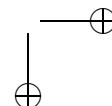
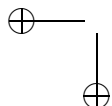
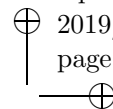
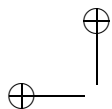
Observamos que se ϕ_1, ϕ_2 é base ortonormal de autovetores de $A_1 : \mathbb{C}^2 \to \mathbb{C}^2$, associados respectivamente aos autovalores λ_1, λ_2, e ψ_1, ψ_2 também é base ortonormal de autovetores de $A_2 : \mathbb{C}^2 \to \mathbb{C}^2$, associados respectivamente aos autovalores β_1, β_2, então

$$\phi_1 \otimes \psi_1 \;, \phi_1 \otimes \psi_2 \;, \phi_2 \otimes \psi_1 \;, \phi_2 \otimes \psi_2$$

é base ortonormal de autovetors de em $A_1 \otimes A_2 : \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \to \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$. Os correspondentes autovalores são $\lambda_1 \, \beta_1$, $\lambda_1 \, \beta_2$, $\lambda_2 \, \beta_1$ e $\lambda_2 \, \beta_2$.

Desta forma se A_1 e A_2 tem apenas autovalores positivos o mesmo ocorre para $A_1 \otimes A_2$. Vamos mostrar em breve que $Tr(A_1 \otimes A_2) = Tr(A_1) \, Tr(A_2)$. Segue do que foi dito acima que se A_1 e A_2 são operadores densidade então $A_1 \otimes A_2$ é operador densidade.

Existe uma generalização natural de todas esta propriedades para um produto tensorial $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 ..., \otimes \mathcal{H}_n$ de espaços de Hilbert $\mathcal{H}_j$, $j = 1, 2, .., n$. Deixamos a cargo o leitor estabelecer esta generalização.

POSTULADO 9. *O espaço de estados de um sistema composto é dado pelo produto tensorial $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 ..., \otimes \mathcal{H}_n$ dos espaços de estados dos subsistemas componentes $\mathcal{H}_j$, $j = 1, 2, .., n$. Além disso, se temos*

sistemas numerados de 1 *a* n*, e o sistema* i *encontra-se no estado* $|\psi_i\rangle$*, então o estado do sistema total é* $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\psi_n\rangle$ *(em termos de operadores densidade, se o sistema na posiçao* i *do lattice encontra-se no estado* ρ_i*, então o estado do sistema total é* $\rho_1 \otimes \rho_2 \otimes \cdots \otimes \rho_n$*).*

O exemplo que descrevemos antes deste postulado descreve de maneira simplificada o que ele afirma de forma bastante geral.

Por exemplo, se o estado ψ em $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$ for de norma 1 e da forma

$$\psi = a_1 \,(|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes |\psi_3\rangle) + a_2(|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes |\phi_3\rangle),$$

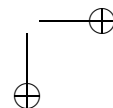
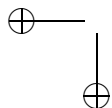
então a probabilidade de ocorrencia de $|\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes |\psi_3\rangle$ é $|a_1|^2$ e a probabilidade de ocorrencia de $|\phi_1\rangle \otimes |\phi_2\rangle \otimes |\phi_3\rangle$ é $|a_2|^2$.

A formulação da analise dos sistemas compostos em termos de produto tensorial é estabelecida em função das leis físicas observadas em diversos experimentos e medições feitos em laboratórios. O postulado 9 estabelece tal fato.

Por exemplo, a observação de experimentos em laboratório indica que se considerarmos um observavel do sistema composto da forma $A_1 \otimes A_2$, onde $A_1 : \mathbb{C}^2 \to \mathbb{C}^2$ $A_2 : \mathbb{C}^2 \to \mathbb{C}^2$ são autoadjuntos, e possuem respectivamente os autovalores λ_1, λ_2 e β_1, β_2, então vai resultar da medição do sistema composto os possiveis valores $\lambda_1 \beta_1$, $\lambda_1 \beta_2$, $\lambda_2 \beta_1$ e $\lambda_2 \beta_2$. Como vimos acima estes são os autovalores dos operador $A_1 \otimes A_2$.

O produto interno em $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 ..., \otimes \mathcal{H}_n$ é dado por

$$< \, (a_1 \otimes a_2 \otimes ... \otimes a_n) \, , \, (b_1 \otimes b_2 \otimes .... \otimes b_n) \, >=$$
$$< a_1, b_1 >_1 < a_2, b_2 >_2 ... < a_n, b_n >_n .$$

Observe que no caso geral de espaços de Hilbert $\mathcal{H}_j$, $j = 1, 2, .., n$ com dimensão infinita, se munirmos $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 ..., \otimes \mathcal{H}_n$ do produto interno natural (descrito acima) e da associada norma então o espaço vetorial assim obtido pode não ser completo (ver discussão interessante em [259] Chapter 2). É necessário completar o espaço via um procedimento padrão. Referimos o leitor para estes procedimentos para o excelente texto [259]. Este espaço completo assim obtido que vamos denominar de produto tensorial $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 ... \otimes \mathcal{H}_n$.

Algumas questões importantes sobre o produto tensorial são as seguintes:

1. O produto tensorial é linear em cada entrada, no sentido de que para todo $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, $\psi, \phi \in \mathcal{H}_1$ e $\xi \in \mathcal{H}_2$,

$$(\alpha\psi + \beta\phi) \otimes \xi = (\alpha\psi) \otimes \xi + (\beta\phi) \otimes \xi$$

e se $\psi \in \mathcal{H}_1$ e $\phi, \xi \in \mathcal{H}_2$,

$$\psi \otimes (\alpha\phi + \beta\xi) = \psi \otimes (\alpha\phi) + \psi \otimes (\beta\xi)$$

e

$$\alpha(\psi \otimes \phi) = (\alpha\psi) \otimes \phi = \psi \otimes (\alpha\phi)$$

2. Existem vetores em $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ que não podem ser escritos como um único produto $\psi \otimes \phi$, quaisquer que sejam $\psi \in \mathcal{H}_1$ e $\phi \in \mathcal{H}_2$. Um exemplo é

$$|\psi\rangle = \frac{|00\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle\Big) \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2,$$

(onde $|0\rangle, |1\rangle$ é uma base ortonormal de $\mathbb{C}^2$) ou seja, não existem estados $|a\rangle$ e $|b\rangle$ tais que $|\psi\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle$.

De fato suponha que $a = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ e $b = \gamma|0\rangle + \delta|1\rangle$.

Assim, se

$$|0\rangle \otimes |0\rangle + |1\rangle \otimes |1\rangle = a \otimes b = \alpha\,\gamma|0\rangle \otimes |0\rangle + \alpha\,\delta|0\rangle \otimes |1\rangle +$$

$$\beta\,\gamma|1\rangle \otimes |0\rangle + \beta\,\delta|1\rangle \otimes |1\rangle,$$

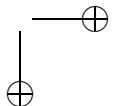
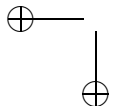
concluimos que $\alpha\,\gamma = 1$, $\beta\,\delta = 1$, $\alpha\,\delta = 0$ e $\beta\,\gamma = 0$. Como isto não é possível, concluímos que não existem tais $a \in \mathbb{C}^2$ e $b \in \mathbb{C}^2$.

Quando tal fato ocorrer, diremos que ψ é um estado **emaranhado**.

Todo vetor em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ pode ser escrito como uma soma de produtos tensoriais (ver (2.3) usando elementos de uma base fixada.

Apesar disto ele poderia ser expresso como apenas "um"produto de dois (quaisquer). Vamos ver um exemplo.

O vetor

$$|\psi\rangle = \frac{|01\rangle + |11\rangle}{\sqrt{2}},$$

é não emaranhado (algumas vezes denominado separável ou fatorável).

De fato,

$$(\frac{1}{\sqrt{2}}\,|0>+\frac{1}{\sqrt{2}}\,|1>)\otimes|1>=\frac{|01\rangle+|11\rangle}{\sqrt{2}}.$$

Os estados emaranhados desempenham papel importante em Informação Quântica (ver por exemplo [268]). Referimos o leitor a seção 3 deste mencionado trabalho para questões relativas a entropia de certos estados emaranhados.

Definição : Considere um sistema composto $\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ e seja $|\psi\rangle$ um estado desse sistema. Sabemos que $|\psi\rangle$ pode ser escrito como uma soma de produtos tensoriais. Se $|\psi\rangle$ não pode ser escrito como um único produto dos seus estados componentes, então dizemos que $|\psi\rangle$ é um estado **emaranhado** (entangled). Se $|\psi\rangle\in\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ pode ser escrito como $|\psi\rangle=\phi\otimes\rho$, onde $\phi,\rho\in\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2$ dizemos que $|\psi\rangle$ é **não emaranhado**.

Outro exemplo de estado emaranhado, quando $\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2=\mathbb{C}^2\otimes\mathbb{C}^2$ é

$$|\psi\rangle=\frac{|01\rangle+|10\rangle}{\sqrt{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|0\rangle\otimes|1\rangle+|1\rangle\otimes|0\rangle\Big),$$

ou seja, não existem estados ϕ e ρ tais que $|\psi\rangle=\phi\otimes\rho$.

Estados não emaranhados traduzem um certo tipo de independencia como vimos antes (mais detalhes em [325] ou na excelente exposição [117]).

Se o estado é emaranhado existe interferencia nas medições. Vamos elaborar sobre isto.

No caso do **estado composto** $\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle\otimes|1\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}|1\rangle\otimes|0\rangle$ se "obtemos via medição"que a posição um é ocupada por um zero então "sabemos"que na posição dois temos um 1 (e vice-verso). Estados emaranhados podem ter esta propriedade. Isto descreve um certo sentido de dependencia.

3. O **produto interno** é definido em vetores produto por

$$\langle\psi_1\otimes\psi_2,\phi_1\otimes\phi_2\rangle:=\langle\psi_1,\phi_1\rangle_{\mathcal{H}_1}\langle\psi_2,\phi_2\rangle_{\mathcal{H}_2}$$

onde os produtos no lado direito são calculados nos espaços de Hilbert indicados. A expressão é extendida para somas de vetores se definimos

$$\langle \psi_1 \otimes \psi_2, (\alpha \phi_1 \otimes \phi_2 + \beta \phi_3 \otimes \phi_4) \rangle$$

$$:= \alpha \langle \psi_1, \phi_1 \rangle_{\mathcal{H}_1} \langle \psi_2, \phi_2 \rangle_{\mathcal{H}_2} + \beta \langle \psi_1, \phi_3 \rangle_{\mathcal{H}_1} \langle \psi_2, \phi_4 \rangle_{\mathcal{H}_2}$$

4. O **produto tensorial de operadores** pode ser definido da seguinte maneira. Sejam A_1 e A_2 operadores em $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$, respectivamente. O produto $A_1 \otimes A_2$ é definido primeiro em vetores produto
$$(A_1 \otimes A_2)\psi_1 \otimes \psi_2 := (A_1\psi_1) \otimes (A_2\psi_2)$$
e depois extendido para somas de produtos de maneira linear:
$$(A_1 \otimes A_2)\psi := \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} \psi_{ij} (A_1 e_i) \otimes (A_2 f_j)$$
Da mesma forma que no caso de vetores, existem operadores em $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ que não podem ser escritos na forma $A_1 \otimes A_2$. Entretanto, todos os operadores podem ser descritos por uma soma de tais operadores produto.

Um conceito que goza de uma certa similaridade com o conceito de não emaranhado é o conceito de decomponível. Ele se aplica a operadores densidade (ver cap 10 em [10]).

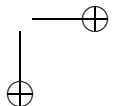
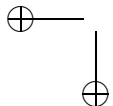
O produto tensorial $M_K \otimes M_N$ é definido de forma similar. Suponha que os operadores a_i formem uma base para M_K e os operadores b_j formem uma base para M_N.

Os elementos A de $M_K \otimes M_N$ podem ser escritos como

$$A = \sum_i \sum_j \psi_{ij} \, a_i \otimes b_j$$

onde $\psi_{ij} \in \mathbb{C}$.

Um operador $A \in M_K \otimes M_N$ age no espaço vetorial $\mathbb{C}^K \otimes \mathbb{C}^N$ como descrito acima. Da mesma forma como antes ele será positivo se para qualquer elemento $\psi \in \mathbb{C}^K \otimes \mathbb{C}^N$ temos que

$$< A\psi, \psi > \geq 0.$$

Note que se $C : \mathbb{C}^K \to \mathbb{C}^K$ e $D : \mathbb{C}^N \to \mathbb{C}^N$ forem operadores positivos então $C \otimes D$ também é positivo.

A definição de operador densidade para operadores $A \in M_K \otimes M_N$, onde $A : \mathbb{C}^K \otimes \mathbb{C}^N \to \mathbb{C}^K \otimes \mathbb{C}^N$ é análoga ao de sempre.

Um operador densidade ρ em $M_K \otimes M_N$ é **decomponível** se ele pode ser escrito como $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2$, onde ρ_1 é operador densidade (um elemento de M_K) e ρ_2 é operador densidade (um elemento em M_N).

O operador projeção $P_{|0\rangle\otimes|0\rangle+|1\rangle\otimes|1\rangle}$ age em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$, e é assim, um elemento em $M_2 \otimes M_2$. Este operador densidade é puro e não é decomponível (ver fim da seção 10.1.0 em [10]).

Definição : Um **operador densidade** $\rho \in M_K \otimes M_N$ **é dito emaranhado** se não existem operadores densidade ρ_1^i, ρ_2^i e probabilidades p_i, tal que ρ possa ser escrito como

$$\rho = \sum_i p_i \, \rho_1^i \otimes \rho_2^i.$$

Observamos que existe um critério simples devido a Horodecki-Peres (ver [179] e [284]) que carateriza o emaranhamento. Um outro critério interessante para emaranhamento no caso da análise de operadores projeção aparece na Prop. 5.5.7 pag. 225 em [33].

Os estados e operadores emaranhados e não decomponíveis desempenham um papel muito importante em Informação Quântica (ver [10], [33], [35], [264], seção 2 em [57] e [335]).

No escólio ao fim da seção 2.7 descrevemos brevemente alguns tópicos em Informação Quântica.

Enunciamos a definição do produto tensorial apenas para obter uma exposição completa. Não precisaremos lembrar da construção formal que fizemos anteriormente, apenas de suas propriedades operacionais. Em particular, será útil definir uma representação matricial, chamada **produto de Kronecker**. Sejam A uma matriz $m \times n$ e B uma matriz $p \times q$. Então temos a seguinte representação matricial:

$$A \otimes B := \begin{pmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \cdots & A_{1n}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \cdots & A_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{m1}B & A_{m2}B & \cdots & A_{mn}B \end{pmatrix}$$

Ou seja, o termo $A_{ij}B$ é o elemento A_{ij} da matriz A multiplicado pela matriz B.

Por exemplo, se

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix},$$

e

$$B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix},$$

então

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & A_{12}B_{11} & A_{12}B_{12} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & A_{12}B_{21} & A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & A_{22}B_{11} & A_{22}B_{12} \\ A_{21}B_{21} & A_{21}B_{22} & A_{22}B_{21} & A_{22}B_{22} \end{pmatrix}.$$

Se, v_1, v_2 e w_1, w_2 são duas bases de $\mathbb{C}^2$, tais que traduzem a ação de, respectivamente, A_1 e A_2, então a matriz acima age no vetor $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$ das quatro cordenadas de um vetor em $u \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ onde $u = \alpha_1(v_1 \otimes w_1) + \alpha_2(v_1 \otimes w_2) + \alpha_3(v_2 \otimes w_1) + \alpha_4(v_2 \otimes w_2)$. Esta ação da matriz quatro por quatro descreve a ação de $A \otimes B$ em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ nesta base.

Note que $Tr(A_1 \otimes A_2) = Tr(A_1)\, Tr(A_2)$.

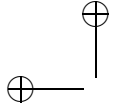
Suponha que estamos analisando um espaço composto $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ e $A : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_1$ é um observável correspondente a primeira variável. Esta ação quando estendida ao espaço composto é descrita por $A \otimes I$, onde I é a identidade em $\mathcal{H}_2$. Nas próximas seções vamos analisar diversos resultados que se utilizam de tal propriedade.

Dada uma matriz densidade $\rho : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ existem matrizes densidade ρ_1 agindo em $\mathcal{H}_1$ e ρ_2 agindo em $\mathcal{H}_2$, tais que para qualquer operador A agindo em $\mathcal{H}_1$

$$Tr[\,(A \otimes I)\, \rho\,] = Tr(A\, \rho_1).$$

Ainda, para qualquer operador B agindo em $\mathcal{H}_2$

$$Tr[\,(I \otimes B)\, \rho\,] = Tr(B\, \rho_2).$$

Os operadores ρ_1 e ρ_2 são algumas vezes chamados de matrizes densidades reduzidas a partir de ρ. Elas fazem o papel no mundo quântico do análogo do que se entenderia por distribuição marginal na probabilidade (ver Lemma 2.3 em [285]).

Poderia se pensar que seria possivel descrever (embora ainda não se soubesse como) a Mecânica Quântica como uma teoria puramente probabilistica (usando as assim denominadas "hidden variables"). Utilizando estado emaranhados (e assumindo localidade e realismo) se pode comprovar que isto não é possível via as desigualdades de Bell. Uma otima exposição curta e simples deste tópico aparece na seção 4.4 de [325].

Apendice: Introdução aos Canais Quânticos

Uma ótima exposição sobre canais quânticos e Informação Quântica pode ser encontrada em [264], [285], [61], [356], [65], [330], [17], [249], [36], [301], [37] ou na seção 6 de [187].

O material desta seção aparece em [235].

Outros resultados relacionados a canais quânticos aparecem em [49].

Denote por M^n o conjunto das matrizes complexas n por n.

Dado V um espaço complexo de Hilbert de dimensão n ≥ 2 denotamos por $\mathcal{L}(V)$ o espaço das transformações lineares de V em si mesmo. Este espaço é isomorfo a M^n.

Então, $Tr_2 : \mathcal{L}(V \otimes V) \to \mathcal{L}(V)$ é por definição $Tr_2(A \otimes B) = Tr(B)\, A$. O operador Tr_2 é denominado **traço parcial**

Denotamos por $\Gamma \subset \mathcal{L}(V)$ o conjunto dos operadores densidade.

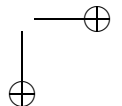
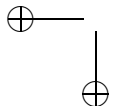
Ja vimos antes que existe uma maneira natural de definir um produto interno em $V \otimes V$ a partir de um produto interno em V (ver item 3. acima). Assim, se pode definir o conceito de operador densidade e operador unitário em $V \otimes V$.

Vamos mostrar em breve que $\Phi = \Phi_U$ preserva Γ. Como Γ é convexo e compacto e Φ é continuo em Γ então existe um ponto fixo para a ação de Φ.

O conjunto dos operadores unitários em $V \otimes V$ é denotado por $\mathcal{U}$.

Fixada uma matriz densidade $\beta : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$ e um operador unitário $U : \mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^n$, a transformação $\Phi : M^n \to M^n$

$$Q \to \Phi(Q) = \operatorname{Tr}_2(U\,(Q \otimes \beta)\,U^*\,) \tag{2.4}$$

descreve a interação da matriz observável Q com a fonte externa β. O resultado de tal operação é $\Phi(Q)$. Na Teoria da Informação Quântica um operador Φ da forma acima que preserva o traço (isto é traço $Q =$ traço $\Phi(Q)$) é conhecido pelo nome de **canal quântico** e é muito estudado

na literatura (ver [264], [260] e chapter 7 e appendix 11 em [285]). Ao fim da seção 2.7 iremos considerar outros aspectos desta teoria.

Se Φ é um canal quântico então dado um operador densidade Q segue que $\Phi(Q)$ é também um operador densidade.

Uma outra representação para canais quânticos agindo em matrizes seria a forma

$$Q \to \tilde{L}(Q) = \sum_{i,j=1}^{d} L_{ij}^{*}\, Q\, L_{ij}, \tag{2.5}$$

onde L_{ij} são matrizes quaisquer.

A expressão (2.4) é conhecida como decomposição de Stinespring e a expressão (2.5) é conhecida como decomposição de Kraus do canal. Para casos mais gerais detes tipo de operador referimos o leitor a [36], [49] or [50].

Escrevemos $A \geq B$ para representar $A - B \geq 0$

Um conjunto importante é o conjunto das matrizes A tais que $I \geq A \geq 0$ (ver [117]).

Definição 2.9. Um operador linear $T : M^m \to M^n$, onde M^n denota o conjunto das matrizes complexas n por n, é dito ser uma **aplicação positiva** quando preserva as matrizes positivas, isto é, $T(A) \geq 0$ (em M_n), para toda matriz $A \geq 0$ (em M_m). Neste caso, também escrevemos $T \geq 0$.

Definição 2.10. Um operador linear $T : M^m \to M^n$, onde M^n denota o conjunto das matrizes complexas n por n, é dito ser **completamente positivo** quando para qualquer k vale que $G = T \otimes Id$ é uma aplicação positiva, onde $Id : M_k \to M_k$ denota a aplicação identidade. Neste caso, também escrevemos $T \geq 0$.

O operador linear Φ descrito acima é positivo e completamente positivo, leva matrizes autoadjuntas em matrizes autoadjuntas e também preserva traço.

Um operador na forma

$$Q \to = \sum_{k=1}^{d} V_k^{*}\, Q\, V_k, \tag{2.6}$$

onde V_k são operadores, é dito estar na forma da decomposição de Kraus.

Pode se mostrar que o operador Φ definido acima é uma aplicação positiva. Isto pode ser mais facilmente confirmado usando a expressão equivalente de Φ via a decomposição de Kraus (que apresentaremos em breve).

Teorema 2.29. *Um operador linear $L : M_m \to M_n$ é totalmente positivo, se e só se, existem operadores $V_k : \mathbb{C}^m \to \mathbb{C}^n$, $1 \leq d \leq n^2$, tal que pode ser escrito na forma de Kraus*

$$L(Q) = \sum_{k=1}^{d} V_k^* \, Q \, V_k.$$

Referimos o leitor para o Theorem 11.24 em [285] para prova desta proposição.

Dada um aplicação positiva $T : M^n \to M^n$ o seu **dual** $T^* : M^n \to M^n$ é a aplicação tal que para todas as matrizes A, B vale

$$< T(A), b >= \text{Traço}(T(A)\, B^*) = \text{Traço}(A\, T(B)^*) =< A, T(B) >$$

onde $< , >$ acima descreve o produto interno no conjunto das matrizes complexas M^n. No presente caso dado T existe T^*.

O canal $I : M_n \to M_n$ denota o canal identidade, ou seja $I(A(= A$.

Abaixo vamos analisar propriedades do canal Φ^* que é o dual do Φ definido acima por (2.4). Por razões que ficarão mais claras mais tarde é natural pensar que Φ esta agindo em observáveis (operadores auto adjuntos) e Φ^* em operadores densidade.

Um teorema importante (ver [107]) afirma que:

Teorema 2.30. *Para toda aplicação $G : M_n \to M_n$ positiva existem $\lambda > 0$, $A \in M_n$ matriz autoadjunta positiva e matriz densidade $\rho \in M_n$ tais que $G(A) = \lambda\, A$ e $G^*(\rho) = \lambda \rho$.*

Este resultado é a versão do teorema de Perron-Frobenius para o setting quântico.

Uma questão importante em Mecânica Quântica e a questão da localidade. Isto deve ser entendido no sentido de que uma ação espacialmente localizada não influencia partes distantes. O aparato matemático

que descreve a Mecânica Quântica possui a propriedade da localidade. Vamos elaborar sobre isto a seguir.

A ação da indentidade agindo num espaço de Hilbert descreve a não existencia de ação, ou seja, nos colocamos na posição de ser apenas um espectador.

Suponha que vamos agir com um canal quantico G (que leva operadores densidade em operadores densidade) numa região descrita pelo espaço de Hilbert $\mathcal{H}_2$ e uma outra parte do universo seria descrita pelo espaço de Hilbert $\mathcal{H}_1$.

Dado operador densidade $\rho = \rho_1 \otimes \rho_2 : \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \to \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$, onde ρ_1, ρ_2 são operadores densidade, temos que $I \otimes G$ descreve a ação de G em $\mathcal{H}_2$ ao mesmo tempo em que não se age (não se observa) na região associada a $\mathcal{H}_2$.

Note que como G preserva operadores densidade temos que

$$Tr_2(\,(I \otimes \Phi)\,(\rho)\,) = Tr_2(\,(I \otimes \Phi)\,(\rho_1 \otimes \rho_2)\,) = Tr(\Phi(\rho_2))\,\rho_1 = \rho_1.$$

Por outro lado temos que

$$Tr_2(\,(\rho_1 \otimes \rho_2)\,) = \rho_1.$$

Isto significa que ρ_1 não foi alterado pela ação de G. É desta forma que a localidade da Mecânica Quântica é descrita em termos matemáticos.

Um dos objetivos do estudo dos canais quânticos é saber o que ocorre com a repetição da ação do canal dual Φ^* sobre uma matriz densidade inicialmente fixada Q_0. Este procedimento é conhecido pelo nome de "iterações quânticas repetidas aleatórias". Dado uma matriz inicial Q_0 nos perguntamos se existe o limite $(\Phi^*)^n(Q_0) \to Q_\Phi$, quando $n \to \infty$. Esta questão está associada a uma pergunta natural que concerne a existencia ou não de um único ponto fixo para a ação de Φ^*.

Em [235] para um β fixado se mostra que existe um conjunto aberto e denso de operadores unitários $U \in \mathcal{U}$, $U : \mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n \otimes \mathbb{C}^n$ tal que Φ^* possui apenas um único ponto fixo. Assim para tal classe de U (para o Φ^* associado a Φ) só pode existir um limite $(\Phi^*)^n(Q_0) \to Q_{\Phi^*}$, quando $n \to \infty$.

Em outra palavras, dado um operador unitário U existe arbitrariamente próximo dele (no sentido das coordenadas da matriz) um outro operador unitário que tem apenas um ponto fixo para a correspondente ação do canal quântico associado Φ^*.

Ainda, se U é tal que existe apenas um ponto fixo para a correspondente ação do canal quântico associado Φ^*, então a mesma propriedade é válida para operadores unitários U que lhe estão suficientemente próximos.

Não vamos apresentar a prova do resultado acima mencionado mas apenas descrever para o leitor **em coordenadas** as expressões a serem consideradas no caso de matrizes Q dois por dois. Entendemos que é instrutivo numa primeira leitura desenvolver com detalhes as contas envolvidas.

Nosso objetivo inicial abaixo é mostrar que o canal Φ (descrito por (2.4)) pode ser expresso na forma $\tilde{L}$ (descrito por (2.5)) mencionada acima. Ainda, mais tarde, vamos mostrar a equação de ponto fixo $\Phi^*(Q) = Q$ para o canal dual Φ^*.

Vamos considerar para simplificar que β é uma matriz diagonal na base $f_1 \in \mathbb{C}^2$, $f_2 \in \mathbb{C}^2$. Assim,

$$\beta = \begin{pmatrix} p_1 & 0 \\ 0 & p_2 \end{pmatrix},$$

$p_1, p_2 > 0$.
Se

$$R = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix},$$

e

$$S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix},$$

então

$$R \otimes S = \begin{pmatrix} R_{11}S_{11} & R_{11}S_{12} & R_{12}S_{11} & R_{12}S_{12} \\ R_{11}S_{21} & R_{11}S_{22} & R_{12}S_{21} & R_{12}S_{22} \\ R_{21}S_{11} & R_{21}S_{12} & R_{22}S_{11} & R_{22}S_{12} \\ R_{21}S_{21} & R_{21}S_{22} & R_{22}S_{21} & R_{22}S_{22} \end{pmatrix}$$

e

$$\mathrm{Tr}_2(R \otimes S) = \begin{pmatrix} R_{11}\,(S_{11} + S_{22}) & R_{12}\,(S_{11} + S_{22}) \\ R_{21}\,(S_{11} + S_{22}) & R_{22}\,(S_{11} + S_{22}) \end{pmatrix}.$$

Dado

$$T=\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} & T_{14}\\ T_{21} & T_{22} & T_{23} & T_{24}\\ T_{31} & T_{32} & T_{33} & T_{34}\\ T_{41} & T_{42} & T_{43} & T_{44}\end{pmatrix}$$

então temos que

$$\mathrm{Tr}_2(T)=\begin{pmatrix} T_{11}+T_{22} & T_{13}+T_{24}\\ T_{31}+T_{42} & T_{33}+T_{44}\end{pmatrix}.$$

A expressão acima é usada no desenvolvimento a seguir.

A ação do operador U em $M_2\otimes M_2$ na base $e_1\otimes f_1$, $e_2\otimes f_1$, $e_1\otimes f_2$, $e_2\otimes f_2$ é descrita pela matriz U da forma 4 por 4 denotada por

$$U=\begin{pmatrix} U_{11}^{11} & U_{11}^{12} & U_{12}^{11} & U_{12}^{12}\\ U_{11}^{21} & U_{11}^{22} & U_{12}^{21} & U_{12}^{22}\\ U_{21}^{11} & U_{21}^{12} & U_{22}^{11} & U_{22}^{12}\\ U_{21}^{21} & U_{21}^{22} & U_{22}^{21} & U_{22}^{22}\end{pmatrix}$$

e assim

$$U^*=\begin{pmatrix} \overline{U_{11}^{11}} & \overline{U_{11}^{21}} & \overline{U_{21}^{11}} & \overline{U_{21}^{21}}\\ \overline{U_{11}^{12}} & \overline{U_{11}^{22}} & \overline{U_{21}^{12}} & \overline{U_{21}^{22}}\\ \overline{U_{12}^{11}} & \overline{U_{12}^{21}} & \overline{U_{22}^{11}} & \overline{U_{22}^{21}}\\ \overline{U_{12}^{12}} & \overline{U_{12}^{22}} & \overline{U_{22}^{12}} & \overline{U_{22}^{22}}\end{pmatrix}$$

Se U é unitária $U\,U^*=I$.

Esta propriedade implica nas seguintes relações:

$$1)\, U_{11}^{11}\,\overline{U_{11}^{11}}+U_{11}^{12}\,\overline{U_{11}^{12}}+U_{12}^{11}\,\overline{U_{12}^{11}}+U_{12}^{12}\,\overline{U_{12}^{12}}=1,$$

$$2)\, U_{11}^{11}\,\overline{U_{11}^{21}}+U_{11}^{12}\,\overline{U_{11}^{22}}+U_{12}^{11}\,\overline{U_{12}^{21}}+U_{12}^{12}\,\overline{U_{12}^{22}}=0,$$

$$3)\, U_{11}^{11}\,\overline{U_{21}^{11}}+U_{11}^{12}\,\overline{U_{21}^{12}}+U_{12}^{11}\,\overline{U_{22}^{11}}+U_{12}^{12}\,\overline{U_{22}^{12}}=0,$$

$$4)\, U_{11}^{11}\,\overline{U_{21}^{21}}+U_{11}^{12}\,\overline{U_{21}^{22}}+U_{12}^{11}\,\overline{U_{22}^{21}}+U_{12}^{12}\,\overline{U_{22}^{22}}=0,$$

$$5)\, U_{11}^{21}\,\overline{U_{11}^{11}}+U_{11}^{22}\,\overline{U_{11}^{12}}+U_{12}^{21}\,\overline{U_{12}^{11}}+U_{12}^{22}\,\overline{U_{12}^{12}}=0,$$

$$6)\, U_{11}^{21}\,\overline{U_{11}^{21}} + U_{11}^{22}\,\overline{U_{11}^{22}} + U_{12}^{21}\,\overline{U_{12}^{21}} + U_{12}^{22}\,\overline{U_{12}^{22}} = 1,$$

$$7)\, U_{11}^{21}\,\overline{U_{21}^{11}} + U_{11}^{22}\,\overline{U_{21}^{12}} + U_{12}^{21}\,\overline{U_{22}^{11}} + U_{12}^{22}\,\overline{U_{22}^{12}} = 0,$$

$$8)\, U_{11}^{21}\,\overline{U_{21}^{21}} + U_{11}^{22}\,\overline{U_{21}^{22}} + U_{12}^{21}\,\overline{U_{22}^{21}} + U_{12}^{22}\,\overline{U_{22}^{22}} = 0,$$

$$9)\, U_{21}^{11}\,\overline{U_{11}^{11}} + U_{21}^{12}\,\overline{U_{11}^{12}} + U_{22}^{11}\,\overline{U_{12}^{11}} + U_{22}^{12}\,\overline{U_{12}^{12}} = 0,$$

$$10)\, U_{21}^{11}\,\overline{U_{11}^{21}} + U_{21}^{12}\,\overline{U_{11}^{22}} + U_{22}^{11}\,\overline{U_{12}^{21}} + U_{22}^{12}\,\overline{U_{12}^{22}} = 0,$$

$$11)\, U_{21}^{11}\,\overline{U_{21}^{11}} + U_{21}^{12}\,\overline{U_{21}^{12}} + U_{22}^{11}\,U_{22}^{11} + U_{22}^{12}\,\overline{U_{22}^{12}} = 1,$$

$$12)\, U_{21}^{11}\,\overline{U_{21}^{21}} + U_{21}^{12}\,\overline{U_{21}^{22}} + U_{22}^{11}\,\overline{U_{22}^{21}} + U_{22}^{12}\,\overline{U_{22}^{22}} = 0,$$

$$13)\, U_{21}^{21}\,\overline{U_{21}^{11}} + U_{21}^{22}\,\overline{U_{21}^{12}} + U_{22}^{21}\,\overline{U_{22}^{11}} + U_{22}^{22}\,\overline{U_{22}^{12}} = 0.$$

$$14)\, U_{21}^{21}\,\overline{U_{11}^{11}} + U_{21}^{22}\,\overline{U_{11}^{12}} + U_{22}^{21}\,\overline{U_{12}^{11}} + U_{22}^{22}\,\overline{U_{12}^{12}} = 0.$$

$$15)\, U_{21}^{21}\,\overline{U_{11}^{21}} + U_{21}^{22}\,\overline{U_{11}^{22}} + U_{22}^{21}\,\overline{U_{12}^{21}} + U_{22}^{22}\,\overline{U_{12}^{22}} = 0.$$

$$16)\, U_{21}^{21}\,\overline{U_{21}^{21}} + U_{21}^{22}\,\overline{U_{21}^{22}} + U_{22}^{21}\,\overline{U_{22}^{21}} + U_{22}^{22}\,\overline{U_{22}^{22}} = 1.$$

A equação 2) é equivalente a 5), a equação 12) é equivalente a 13), a equação 8) é equivalente a 15), a equação 3) é equivalente a 9), a equação 7) é equivalente a 10) e a equação 4) é equivalente a 14). Temos assim 6 parametros livres para os coeficientes de U.

Usando as entradas U_{rs}^{ij} consideradas acima se pode escrever (como prometido) a ação de Φ como (ver por exemplo [235])

$$\Phi(Q) = \tilde{L}(Q) = p_1 \sum_{i=1}^{2} \begin{pmatrix} \overline{U}_{11}^{i1} & \overline{U}_{21}^{i1} \\ \overline{U}_{12}^{i1} & \overline{U}_{22}^{i1} \end{pmatrix} Q \begin{pmatrix} U_{11}^{i1} & U_{12}^{i1} \\ U_{21}^{i1} & U_{22}^{i1} \end{pmatrix} +$$

$$p_2 \sum_{i=1}^{2} \begin{pmatrix} \overline{U_{11}^{i2}} & \overline{U_{21}^{i2}} \\ \overline{U_{12}^{i2}} & \overline{U_{22}^{i2}} \end{pmatrix} Q \begin{pmatrix} U_{11}^{i2} & U_{12}^{i2} \\ U_{21}^{i2} & U_{22}^{i2} \end{pmatrix}$$

Podemos considerar matrizes auxiliares L_{ij} e descrever a expressão acima como

$$\tilde{L}(Q) = \sum_{i=1}^{2} (\sqrt{p_1}\,(U^{i1})^*)\, Q\, (\sqrt{p_1}\, U^{i1}) + \sum_{i=1}^{2} (\sqrt{p_2}\,(U^{i2})^*)\, Q\, (\sqrt{p_2}\, U^{i2}) =$$

$$\sum_{i=1}^{2} L_{i1}^*\, Q\, L_{i1} + \sum_{i=1}^{2} L_{i2}^*\, Q\, L_{i2} = \sum_{i.j=1}^{2} L_{ij}^*\, Q\, L_{ij}. \quad (*)$$

A partir do fato que $U\,U^* = I$ pode se mostrar que

$$\tilde{L}(I) = I.$$

Note que $\tilde{L}$ preserva o cone das matrizes positivas.

Além disto, usando também as entradas U_{rs}^{ij} descritas acima introduzimos outro operador (o dual de $\tilde{L}$) denotado por

$$\hat{L}(Q) = p_1 \sum_{i=1}^{2} \begin{pmatrix} U_{11}^{i1} & U_{12}^{i1} \\ U_{21}^{i1} & U_{22}^{i1} \end{pmatrix} Q \begin{pmatrix} \overline{U_{11}^{i1}} & \overline{U_{21}^{i1}} \\ \overline{U_{12}^{i1}} & \overline{U_{22}^{i1}} \end{pmatrix} +$$

$$p_2 \sum_{i=1}^{2} \begin{pmatrix} U_{11}^{i2} & U_{12}^{i2} \\ U_{21}^{i2} & U_{22}^{i2} \end{pmatrix} Q \begin{pmatrix} \overline{U_{12}^{i2}} & \overline{U_{21}^{i2}} \\ \overline{U_{12}^{i2}} & \overline{U_{22}^{i2}} \end{pmatrix} = \sum_{i.j=1}^{2} L_{ij} Q L_{ij}^*.$$

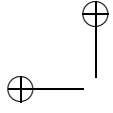
Pode se mostrar que $\hat{L}(Q) = Tr_2[\,U\,(Q \otimes \beta)\,U^*\,] = \Phi(Q)$ (ver [260]).

A primeira expressão (*) acima - como dissemos antes - está na forma da **decomposição de Kraus** e a segunda $Tr_2[\,U\,(Q \otimes \beta)\,U^*\,]$ na forma de **Stinespring dilation** de Φ (mais detalhes em [285] - chapter 7 e appendix 11 ou em [17]).

A expressão decomposição de Stinespring também é as vezes usada em vez de Stinespring dilation.

O operador $\hat{L}$ preserva o conjunto das matrizes densidade.

De fato, se Q is um matriz densidade, então

$$Tr(\hat{L}(Q)) = Tr(\sum_{i.j=1}^{2} L_{ij} Q L_{ij}^*) = \sum_{i.j=1}^{2} Tr(L_{ij} Q L_{ij}^*) = \sum_{i.j=1}^{2} Tr(Q\, L_{ij}^* L_{ij}) =$$

$$Tr(\sum_{i.j=1}^{2} Q\, L_{ij}^{*} L_{ij}) = Tr(Q \sum_{i.j=1}^{2} L_{ij}^{*} L_{ij}) = Tr(Q) = 1$$

Ainda, se $Q = A\, A^*$, então note que

$$\sum_{i.j=1}^{2} L_{ij} Q L_{ij}^{*} = \sum_{i.j=1}^{2} L_{ij} (A\, A^*) L_{ij}^{*} = \sum_{i.j=1}^{2} (L_{ij}\, A)\, (\, A^* L_{ij}^{*}\,) =$$

$$\sum_{i.j=1}^{2} (L_{ij}\, A)\, (\, L_{ij}\, A\,)^*$$

é positiva.

Logo, se Q é positiva então $\hat{L}(Q)$ é positiva.

Denotamos
$$Q = \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix}.$$

Então,

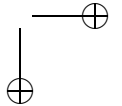
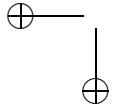
$$U^{ij}\ Q\ (U^{ij})^* = \begin{pmatrix} U_{11}^{ij} & U_{12}^{ij} \\ U_{21}^{ij} & U_{22}^{ij} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q_{11} & Q_{12} \\ Q_{21} & Q_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{U_{11}^{ij}} & \overline{U_{21}^{ij}} \\ \overline{U_{12}^{ij}} & \overline{U_{22}^{ij}} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \overline{U_{11}^{ij}}(U_{11}^{ij}Q_{11} + U_{12}^{ij}Q_{21}) + \overline{U_{12}^{ij}}(U_{11}^{ij}Q_{12} + U_{12}^{ij}Q_{22}) & \overline{U_{21}^{ij}}(U_{11}^{ij}Q_{11} + U_{12}^{ij}Q_{21}) + \overline{U_{22}^{ij}}(U_{11}^{ij}Q_{12} + U_{12}^{ij}Q_{22}) \\ \overline{U_{11}^{ij}}(U_{21}^{ij}Q_{11} + U_{22}^{ij}Q_{21}) + \overline{U_{12}^{ij}}(U_{21}^{ij}\, Q_{12} + U_{22}^{ij}Q_{22}) & \overline{U_{21}^{ij}}(U_{21}^{ij}Q_{11} + U_{22}^{ij}Q_{21}) + \overline{U_{22}^{ij}}(U_{21}^{ij}Q_{12} + U_{22}^{ij}Q_{22}) \end{pmatrix},$$

A fim de encontrar o ponto fixo necessitamos calcular

$$\hat{L}(Q) = p_1\, [\, U^{11}\, Q\, (U^{11})^* + U^{21}\, Q\, (U^{21})^*\,] + p_2\, [\, U^{12}\, Q\, (U^{12})^* + U^{22}\, Q\, (U^{22})^*\,].$$

A coordenada a_{11} de $\hat{L}(Q)$ é

$$\begin{aligned} & p_1\, [\, \overline{U_{11}^{11}}(U_{11}^{11}Q_{11} + U_{12}^{11}Q_{21}) \,+\, \overline{U_{12}^{11}}(U_{11}^{11}Q_{12} + U_{12}^{11}Q_{22})\,] + \\ & p_1\, [\, \overline{U_{11}^{21}}(U_{11}^{21}Q_{11} + U_{12}^{21}Q_{21}) \,+\, \overline{U_{12}^{21}}(U_{11}^{21}Q_{12} + U_{12}^{21}Q_{22})\,] + \\ & p_2\, [\, \overline{U_{11}^{12}}(U_{11}^{12}Q_{11} + U_{12}^{12}Q_{21}) \,+\, \overline{U_{12}^{12}}(U_{11}^{12}Q_{12} + U_{12}^{12}Q_{22})\,] + \\ & p_2\, [\, \overline{U_{11}^{22}}(U_{11}^{22}Q_{11} + U_{12}^{22}Q_{21}) \,+\, \overline{U_{12}^{22}}(U_{11}^{22}Q_{12} + U_{12}^{22}Q_{22})\,]. \end{aligned} \tag{2.7}$$

A coordenada a_{12} de $\hat{L}(Q)$ é

$$\begin{aligned} &p_1\,[\,\overline{U^{11}_{21}}(U^{11}_{11}Q_{11}+U^{11}_{12}Q_{21})\,+\,\overline{U^{11}_{22}}(U^{11}_{11}Q_{12}+U^{11}_{12}Q_{22})\,]+\\ &p_1\,[\,\overline{U^{21}_{21}}(U^{21}_{11}Q_{11}+U^{21}_{12}Q_{21})\,+\,\overline{U^{21}_{22}}(U^{21}_{11}Q_{12}+U^{21}_{12}Q_{22})\,]+\\ &p_2\,[\,\overline{U^{12}_{21}}(U^{12}_{11}Q_{11}+U^{12}_{12}Q_{21})\,+\,\overline{U^{12}_{22}}(U^{12}_{11}Q_{12}+U^{12}_{12}Q_{22})\,]+\\ &p_2\,[\,\overline{U^{22}_{21}}(U^{22}_{11}Q_{11}+U^{22}_{12}Q_{21})\,+\,\overline{U^{22}_{22}}(U^{22}_{11}Q_{12}+U^{22}_{12}Q_{22})\,]. \end{aligned} \tag{2.8}$$

Como a matriz $\hat{L}(Q)$ é uma matriz densidade basta saber a_{12} e a_{12} para determiná-la.

Referimos o leitor para a seção final de [235] onde são descritos os detalhes da prova de que é aberto e denso (no caso de matrizes Q dois por dois) o conjunto das matrizes unitárias U que determinam canais quânticos Φ com apenas um ponto fixo único.

2.6 C^*-álgebras e estados KMS

Referimos o leitor a [187], [209], [52] [286] [94] [292] [293] [214] para mais detalhes sobre o material apresentado na presente seção.

Em [353] o autor considera também Algebras de Von Neumann e módulos de Hilbert.

Definição 2.11. Uma **álgebra** A sobre $\mathbb{C}$ é um espaço vetorial complexo equipado com uma operação bilinear e associativa $\bullet : A \times A \to A$, dita multiplicação. Para $a, b \in A$, denotaremos $\bullet(a, b)$ simplesmente por ab.

A algebra que estaremos interessados aqui é a dos operadores agindo num espaço de Hilbert onde $\bullet$ é a composta de operadores.

Definição 2.12. Uma **álgebra normada** é uma álgebra A sobre $\mathbb{C}$ equipada com uma função norma $a \in A \mapsto \|a\| \in \mathbb{R}$, que torna A um espaço normado, ou seja, para $a, b \in A$ e $\lambda \in \mathbb{C}$, temos

1. $\|a\| \geq 0$, e $\|a\| = 0 \Rightarrow a = 0$
2. $\|\lambda a\| = |\lambda|\|a\|$, onde $|\lambda|$ denota o módulo do número complexo λ
3. $\|a + b\| \leq \|a\| + \|b\|$,

e que além disso obedece a seguinte propriedade:

4. $\|ab\| \leq \|a\|\|b\|$

Se existir um elemento, denotado por 1 tal que para qualquer a vale $a\,1 = a = 1\,a$, dizemos que é a identidade multiplicativa. Dado a, se axistir b tal que $a\,b = 1 = b\,a$, dizemos que a é inversível.

Note que $a\,0 = 0 = 0\,a$, para qualquer a

Quando a Algebra for a de operadores limitados A então a norma do operador $|A|$ já for definido anteriormente na seção em que apresentamos os pré-requisitos.

Naturalmente, podemos nos referir à distância entre dois elementos de uma álgebra normada, bastando para isso considerar a métrica induzida pela norma.

Definição 2.13. Uma **álgebra de Banach** é uma álgebra normada completa. Ou seja, toda sequencia de Cauchy converge.

Definição 2.14. Seja A uma álgebra de Banach. Uma **involução** em A é uma função $*: A \to A$ tal que para todo $a, b \in A$, $\lambda \in \mathbb{C}$, e denotando $c^* := *(c)$, $\forall\ c \in A$, temos

1. $(a+b)^* = a^* + b^*$
2. $(\lambda a)^* = \overline{\lambda} a^*$
3. $(ab)^* = b^* a^*$
4. $(a^*)^* = a$
5. $\|a^*\| = \|a\|$

Note que a é inversível, se e só se, a^* é inversível.

Definição 2.15. Uma C^***-álgebra** é uma álgebra de Banach equipada com uma involução para o qual vale

$$\|a^* a\| = \|a\|^2,\ \forall\, a \in A.$$

Para algebras de operadores a operação $*$ vai denotar o adjunto do operador.

Um exemplo que satisfaz o descrito acima seria a álgebra M_n da matrizes de ordem n sobre $\mathbb{C}$ é uma C^*-álgebra se considerarmos as

matrizes como sendo operadores no espaço euclideano $\mathbb{C}^n$ e se tomarmos a norma de operadores $\| \cdot \|$ sobre matrizes. A involução é dada pela matriz transposta conjugada.

Seja um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, e, o conjunto dos operadores limitados sobre $\mathcal{H}$, munidos da operação $*$ (A^* seria tomar o adjunto do operador A) e da **norma de operadores**. Neste caso, o conjunto dos **operadores limitados** com a operaçao de composição formam uma C^***-algebra e o leitor deve tomar este como o exemplo canônico**.

Outra C^*-Algebra que estamos particularmente interessados é a dos operadores limitados (munido da norma de operador descrita na seção inicial do texto $||\,.\,||$) agindo no espaço de Hilbert complexo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ onde $*$ denota tomar o adjunto do operador. A operação $\bullet$ é a composta de operadores.

Vamos mostrar agora para a algebra de operadores que vale a expressão da definição 2.15.

Afirmamos que $||T||^2 = ||T^*\,T||$. Vamos mostrar também que $||T|| = ||T^*||$.

Note primeiro que se sabe que $||T^*\,T|| \leq ||T||| \, ||T^*||$.

Ainda, vale para qualquer $x \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$

$$|T(x)|^2 =< T(x), T(x) >=< T^*\,T(x), x > \leq ||T^*\,T||\,|x|^2.$$

Sendo assim, $||T||^2 \leq ||T^*\,T||$.

Logo, segue das duas desigualdades que $||T||\,||T|| = ||T||^2 \leq ||T\,T^*|| \leq ||T|||\,||T^*||$.

Logo, para qualquer T vale que $||T|| \leq ||T^*||$.

Finalmente, substituindo T por T^* na ultima desigualdade segue que $||T^*|| \leq ||(T^*)^*|| = ||T||$.

Logo, $||T||| = ||T^*||$.

Por outro lado, $||T||^2 = ||T^*||\,||T|| \geq ||T^*\,T|| \geq ||T||^2$.

Portanto, $||T||^2 = ||T^*\,T||$. In the same way $||T||^2 = ||T\,T^*||$

Um homorfismo entre duas C^*-algebras $\mathcal{A}_1$ e $\mathcal{A}_2$ é uma aplicação linear $G : \mathcal{A}_1 \to \mathcal{A}_2$ tal que para qualquer $a_1,\, b_1 \in \mathcal{A}_1$ temos que $G(a_1 \bullet b_1) = G(a_1) \bullet G(b_1)$ e ainda que $G(a_1^*) = G(a_1)^*$.

No caso particular das C^*-algebra de operadores limitados isto significa que para os operadores A_1 e B_1 vale $G(A_1 \circ B_1) = G(A_1) \circ G(B_1)$.

Um isomorfismo entre duas C^*-algebras é um homorfismo bijetivo.

A identidade multiplicativa (o elemento 1 na algebra) é o operador identidade.

Note que se A é da forma $A = \sum_j \lambda_j P_{\psi_j}$, onde ψ_j, $j \in \mathbb{N}$, forma um conjunto ortonormal completo, então $A^* = \sum_j \overline{\lambda_j} P_{\psi_j}$ e $A\,A^* = \sum_j |\lambda_j|^2 \, P_{\psi_j}$.

Na C^*-álgebra complexa dos operadores de Hilbert-Schmidt podemos definir um produto interno $<,>$ através da expressão $< A, B >= \text{tr}\,(A\,B^*)$.

É possível tambem falar em espectro neste setting mais abstrato.

Definição 2.16. Dizemos que $\lambda \in \mathbb{C}$ pertence ao espectro pontual de a se $a - \lambda 1$ é não inversível, onde 1 é a unidade multiplicativa na C^*-álgebra

Note que

$$(a - \overline{\lambda} 1)^* = (a^* - \lambda 1).$$

Considere o conjunto dos operadores limitados agindo no espaço de Hilbert complexo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ onde $*$ denota tomar o adjunto do operador e a operação $\bullet$ é a composta de operadores.

Lembre que $\lim_{n\to\infty} A_n = A$, no sentido forte, se para qualquer φ temos que

$$\lim_{n\to\infty} |A_n(\varphi) - A(\varphi)\,| \, = 0.$$

O conjunto dos operadores limitados agindo no espaço de Hilbert complexo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ munido da convergencia no **sentido forte** define o que se chama uma W^*-Algebra ou tambem conhecida como **von Neumann algebra** (ver considerações após Corollary 5.7 em [187]). Uma ótima referencia sobre C^*-algebras e algebras de von Neumann relacionadas com Mec. Quantica é [353].

Um resultado importante na teoria é que uma C^*-Algebra comutativa abstrata é isomorfa a algebra das funções continuas num espaço topológico Hausdorff X. Por sua vez um W^*-Algebra comutativa abstrata é isomorfa a algebra das funções no espaço L^∞ relativo a um medida μ num certo espaço mensurável Y. Assim, com advogado por A. Connes uma W^*-algebra geral corresponde a teoria da medida não comutativa enquanto que um C^*-algebra geral corresponde a teoria topológica não comutativa (ver considerações gerais sobre o assunto na seção 3.7.1 de [82]).

Vamos falar agora de alguns resultados em Mecânica Estatística Quântica (maiores detalhes em [269] , [52], [273] e [290]) que de certa forma generalizam (no setting Quântico) os resultados e perguntas naturais oriundas da Mecânica Estatística. Na seção 2.8 vamos dar uma breve descrição de algumas questões analisadas na Mecânica Estatística com o intuito de auxiliar o entendimento do assunto da presente seção pelo leitor.

Vamos denotar por $\mathcal{U}$ uma C^*-Algebra fixada. Destacamos aqui o fato que a C^*-Algebra que estamos interessados é a dos operadores limitados agindo no espaço de Hilbert complexo $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$ onde $*$ denota tomar o adjunto do operador.

Referimos o leitor (que deseja mais detalhes) ao interessante artigo "Gap Labelling Theorems for Schrödinger operators"de J. Bellissard em [352] que discute na seção 1.3 pagina 548 a questão de considerar operadores limitados ou não no setting de C^*-Algebras. Neste trabalho também é discutida a questão: é natural considerar os problemas de Mecânica Quântica no setting de Geometria não Comutativa e gupoids (ver seção 1 e 2) ?

Denotamos por $\text{Aut}(\mathcal{U})$ o conjunto dos automorfismo lineares na C^*-Algebra $\mathcal{U}$.

Um elemento G em $\text{Aut}(\mathcal{U})$ deve ser tal que $G(a\,b) = G(a)\,G(b)$. Ainda, se assume que $G(a)^* = G(a^*)$.

Definição 2.17. Dada uma C^*-algebra $\mathcal{U}$, um homorfismo de grupo é uma família continua σ_t, indexada por $t \in \mathbf{R}$ onde $\sigma_t \in \text{Aut}(\mathcal{U})$, e, tal que para qualquer $t, s \in \mathbf{R}$ vale $\sigma_{t+s} = \sigma_t \circ \sigma_s$.

σ_t, $t \in \mathbb{R}$, descreve o análogo não comutativo do que é um sistema dinâmico clássico.

Vamos apresentar um exemplo: seja H um operador autoadjunto então $e^{tH\,i}$ define um homomorfismo de grupo σ_t através de $\sigma_t(B) = e^{tH\,i} \circ B \circ e^{-tH\,i}$ que age em operadores limitados B. Observe que, de fato, para todo t vale $\sigma_t(A\,B) = \sigma_t(A)\,\sigma_t(B)$. Ainda, para todo operador A vale $\sigma_{t+s}(A) = e^{tH\,i}\,(e^{sH\,i} \circ B \circ e^{-sH\,i}\,)\,e^{-tH\,i} = \sigma_t(\sigma_s(A))$.

Ainda, $\sigma_t(A^*) = (\sigma_t(A))^*$.

Em termos do formalismo de C^*-sistemas dinâmicos, o operador H define a evolução temporal $e^{t\,iH}$, para cada $t \in \mathbf{R}$. Fixado um valor positivo β real vamos analisar em breve o sistema para o operador $t\,i\,(\beta\,i)H$,

ou seja, o sistema dinâmico $e^{-t\beta H}$. O valor β vai desempenhar o papel do valor do inverso da temperatura em Mecânica Estatística Quântica.

Definição 2.18. Um elemento a na C^*-Algebra é positivo, se ele é da forma $a = bb^*$ onde b é um elemento C^*-Algebra.

Definição 2.19. Por definição um estado C^*-dinamico é um funcional linear $\phi : \mathcal{U} \to \mathbb{C}$, tal que

a) $\phi(I) = 1$

b) $\phi(a)$ é um número positivo para cada elemento positivo a na C^*-Algebra $\mathcal{U}$.

Se ϕ é tal que $\phi(a\,a^*) = 0$, se e só se $a = 0$, dizemos que ϕ é faithful.

Se ϕ é tal que para quaisquer a, b vale $\phi(a\,b) = \phi(b\,a)$, dizemos que ϕ é um traço estado C^*-dinamico.

Seja um operador densidade ρ fixado, então, ϕ definido por $A \to \phi(A)=$ traço $(\rho\, A)$, é um estado C^*-dinâmico. Isto segue da observação que fizemos na seção 1.8.

Na C^*-Algebra das matrizes complexas n por n, dada as probabilidades $p_1, p_2, .., p_n$, então

$$w(A) = \sum p_j A_{jj}$$

define um C^*-estado em M_n.

Outro exemplo simples é o seguinte: seja M_n a C^*-álgebra M_n, $n \in \mathbb{N}$, das matrizes n por n sobre $\mathbb{C}$. Seja $\rho : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$ um operador densidade fixado. Então defina $\phi : M_n \to \mathbb{C}$ dado por

$$\phi(A) = \text{traço } (\rho\, A).$$

Tal ϕ é um estado C^*-dinâmico.

Note que se $\rho = P_\psi$ fosse operador projeção, então, como vimos (vide consderações após a definição 1.20)

$$\phi(A) = \text{traço } (P_\psi\, A) = E(A)_\psi = < A(\psi), \psi > \; .$$

Um estado C^*-dinâmico ϕ agindo em uma C^*-Algebra desempenha o papel de uma probabilidade ν na Mecânica Estatística ou no Formalismo

Termodinamico. Podemos pensar que $\phi(A)$ é o valor obtido ao integrar o observavel A pelo estado C^*-dinâmico ϕ.

O estado ϕ vai agir em observáveis a (operadores autoadjunto que pertencem a C^*-Algebra $\mathcal{U}$). Note que $\phi(a)$ é real se a é autoadjunto (ver [52]).

Assim, $\phi(a)$ é a "integral"da "função"$a \in \mathcal{U}$ via a "probabilidade"ϕ (um estado C^*-dinâmico).

Dado um estado C^*-dynamico ϕ agindo nos operadores limitados num espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, ou seja, $\phi : B(\mathcal{H}) \to \mathbb{C}$, então existe uma matriz densidade ρ_ϕ tal que para todo A vale $\phi(A) = \text{Tr } (\rho_\phi A)$ (ver [117]).

Esta subentendido na afirmação acima que isto ocorre se todos os termos envolvidos estão bem definidos.

Os conceitos anteriores descritos na parte inicial do texto (considerando apenas o conceito de estado ψ) podem ser vistos de uma forma mais geral. Se o sistema quântico em consideração é descrito pelo estado C^*-dinâmico ϕ e vamos fazer medições utilizando um operador autoadjunto L que tem decomposição espectral $L = \sum_n \lambda_n P_{\phi_n}$, então $\phi(P_{\phi_n})$ é a probabilidade de se observar λ_n.

Isto é a extensão natural de um postulado anterior.

Vamos explicar este fato num caso bem simples (em dimensão 2). Seja $\rho = P_\psi$ e o estado C^*-dinâmico $\phi : M_2 \to \mathbb{C}$ dado por

$$\phi(L) = \text{Tr}(\rho L) =< L\psi, \psi > .$$

Seja $L : \mathbb{C}^2 \to \mathbb{C}^2$ operador autoadjunto tal que sua decomposiçao espectral é $L = \lambda_1 P_{\phi_1} + \lambda_2 P_{\phi_2}$.

Assim ϕ_1 é ortogonal a ϕ_2 e os dois vetores tem norma 1.

Seja $\psi = a_1\phi_1 + a_2\phi_2$

Um dos postulados afirma que se o sistema está no estado ψ então a probabilidade de se medir λ_1 eh a_1^2.

Por outro lado

$$w(P_{\phi_1}) = Tr(\rho P_{\phi_1}) =< P_{\phi_1}\psi, \psi >=$$

$$< a_1\phi_1, a_1\phi_1 + a_2\phi_2 >=< a_1\phi_1, a_1\phi_1 >= a_1^2.$$

Assim faz sentido dizer que se o C^*-estado é ϕ então $\phi(P_{\phi_1})$ é a probabilidade de ocorrer λ_1 através da medição via L. Exemplos interessantes de estados em espaços fe Fock aparecem na seção 6 de [117].

Dizemos que $B : \mathbb{C} \to \mathcal{U}$ é uma função analítica se existem $a_j, j \in \mathbb{N}$, tais que para todo $z \in \mathbb{C}$

$$B(z) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \, z^j.$$

Definição 2.20. Um elemento $a \in \mathcal{U}$ é dito analítico para o homorfismo de grupo a um parametro definido por σ_t, $t \in \mathbb{R}$, se $\sigma_t(a)$ tem uma extensão analitica da variável $t \in \mathbb{R}$ para a variável $t \in \mathbb{C}$.

A definição acima diz que a é analítico se a função de variavel real $t \to \sigma_t(a) \in \mathcal{U}$ pode ser extendida a uma função $B(z)$ que é analítica em z.

Sob condições muito gerais os elementos analíticos $a \in \mathcal{U}$ são densos em $\mathcal{U}$ (ver [286]). Muitos resultados na teoria das C^*-Algebras são demonstrados da seguinte forma: se prova primeiro a propriedade para os a analíticos, e depois, via limite, se mostra a propriedade desejada para todos elementos de $\mathcal{U}$.

Note que se A é analítico e $\sigma_t(A) = e^{tH\,i} \, A \, e^{-tH\,i}$, $t \in \mathbb{R}$, então, fica bem definido $e^{-sH} \, A \, e^{sH}$, onde s é real. De fato, extenda o t de $e^{tH\,i} \, A \, e^{-tH\,i}$ ao complexo si.

Exemplo 2.5. Considere o operador Hamiltoniano $\mathbf{H} = \frac{\mathcal{P}^2}{2\,m} + \frac{1}{2} m \, w^2 \, \mathcal{X}^2$ obtido da quantização do oscilador harmônico.

Neste caso a C^*-Algebra $\mathcal{U}$ é o conjunto dos operadores lineares limitados $A : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx) \to \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)(dx)$. A operação $*$ corresponde a tomar o adjunto do operador. O estado ϕ age em tais operadores.

Sabemos que $\mathbf{H}$ tem autovalores da forma $(n + 1/2)\,\hbar w$. Os autovalores de $e^{-\beta \mathbf{H}}$ são da forma $e^{-\,(n+1/2)\,\beta\,\hbar\,w}$.

Assim,

$$\text{traço}\, e^{-\beta \mathbf{H}} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\,(n+1/2)\,\hbar\,w} = \frac{e^{-(1/2)\,\beta\,\hbar\,w}}{1 - e^{-\,\beta\,\hbar\,w}}$$

é finito se $\beta > 0$.

Desta forma fica bem definido

$$C = \frac{e^{-\beta \mathbf{H}}}{\text{traço } e^{-\beta \mathbf{H}}},$$

que tem traço 1 e é positivo.

C é um operador densidade. Desta forma $B \to$ traço $(C\,B)$ define um estado C^*-dinâmico.

O resultado acima exibe um exemplo de grande importância na teoria da Mecânica Estatística Quântica.

Definição 2.21. Dados um $\beta \in \mathbb{R}$ e um grupo de automorfismos σ_t indexados por $t \in \mathbb{R}$, então, por definição, ϕ é um **C^*-estado KMS associado ao grupo de automorfismos σ_t e a β** na C^*-Algebra $\mathcal{U}$, se ϕ é um estado C^*-dinâmico, tal que para todo $b \in \mathcal{U}$ e todo $a \in \mathcal{U}$ analítico, temos que

$$\phi(a.b) = \phi(b.\sigma_{\beta i}(a)).$$

Para H fixado, se σ_t é da forma $A \to \sigma_t(A) = e^{tH\,i}\,A\,e^{-tH\,i}$, para todo t, então fixado β, é usual denotar por $\phi_{H,\beta}$ o estado KMS associado. Num certo sentido, como veremos, $\phi_{H,\beta}$ corresponde a medida de Gibbs associada ao potencial H na temperatura $\frac{1}{\beta}$ (ver [269])

A sigla KMS se refere a Kubo, Martin and Schwinger que deram contribuições muito importantes na formalizaçao desta Teoria.

Denotamos por ϕ estado C^*-dinâmico qualquer.

Suponha fixado o grupo de automorfismos σ_t, $t \in \mathbb{R}$. É fácil ver que para β fixado, a condição

$$\phi(a.b) = \phi(b.\sigma_{\beta i}(a)),$$

é equivalente a: $\forall \tau \in \mathbf{C}$,

$$\phi(\sigma_\tau(a).b) = \phi(b.\sigma_{\tau+\beta i}(a)).$$

Segue da seção 8.12 em [286] que se ϕ é um estado KMS para β, então para todo $a \in \mathcal{U}$ analítico fixado, temos que $\tau \to \phi(\sigma_\tau(a))$ é uma função analítica limitada definida em todo plano, e, sendo assim uma constante (ver [77]). Neste sentido podemos dizer que ϕ é estacionário (não varia com a variação de t). Fazendo um paralelo com o setting clássico, esta afirmação seria como dizer que para uma certa medida μ (que seria estacionária), para qualquer f continua, a integral $\int f \circ \sigma_\tau \, d\mu$, seria constante, independente de τ, onde σ_τ é o fluxo (sistema dinâmico) de alguma equação diferencial fixada. Assim, a "integral"$\phi(\sigma_\tau(a))$ da

"função"$\sigma_\tau(a)$ (que descreve a evolução dinâmica da "função"a através do "fluxo"σ_τ) é constante, se a é um elemento analítico em $\mathcal{U}$.

Um estudo mais profundo dos estados KMS dentro da Mecânica Quântica podem ser encontrado em [94].

Vamos elaborar um pouco sobre a condição KMS para o homorfismo de grupo σ_t, $t \in \mathbb{R}$, onde $\sigma_t(A) = e^{it\,\mathbf{H}}\, A\, e^{-it\,\mathbf{H}}$. Tome $t = \beta\, i$. Note que $\sigma_{\beta i}(A) = e^{-\beta\mathbf{H}}\, A\, e^{\beta\mathbf{H}}$. Vamos supor que $\frac{e^{-\beta\mathbf{H}}}{\text{traço } e^{-\beta\mathbf{H}}}$ seja um operador densidade como no exemplo acima.

Estamos interessados, para todo valor real β fixado, nos estados ρ tais que para todo A, B

$$\rho(A\,\sigma_{\beta i}(B)) = \rho(B\,A).$$

É natural esperar, para um β fixo, que isto vá estar de alguma forma associada ao operador densidade $\frac{1}{tr(e^{-\beta H})}\, e^{-\beta H}$. Isto de certa forma é o análogo do que acontece na Mecânica Estatística (ver seção 1.10). O operador densidade $\frac{1}{tr(e^{-\beta H})}\, e^{-\beta H}$ se denomina de **operador densidade de Gibbs (operador KMS) associado a** $-\beta$ **H**. Ao fim desta seção iremos novamente considerar os operadores densidade KMS.

Isto é de fato verdade no seguinte sentido: considere o estado C^*-dinâmico ρ, tal que para todo $A \in \mathcal{U}$ temos

$$\rho(A) = tr(\frac{1}{tr(e^{-\beta H})}\, e^{-\beta H}\;\; A).$$

Então,

$$\rho(A\,\sigma^{\beta i}(B)) = tr(\frac{1}{tr(e^{-\beta H})}\, e^{-\beta H} A \quad e^{-\beta\, H} B\, e^{\beta\, H}) =$$

$$tr(\frac{1}{tr(e^{-\beta H})}\, e^{-\beta H} A \;\; [\, e^{-\beta\, H} B\, e^{\beta\, H}\,])$$

$$tr(\,[\, e^{-\beta\, H} B\, e^{\beta\, H}\,]\;\frac{1}{tr(e^{-\beta H})}\, e^{-\beta H} A\;\;) = tr(\frac{1}{tr(e^{-\beta H})}\;\, e^{-\beta\, H}\; B\,A) = \rho(B\,A).$$

Desta forma concluímos que é bem natural a introdução do estado KMS via o formalismo acima descrito.

Como dissemos antes, é natural pensar que ρ desempenha o papel do estado de Gibbs a temperatura T, com $\beta = \frac{1}{T}$. De fato, se **H** fosse diagonal da forma

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} U_1 & 0 \\ 0 & U_2 \end{pmatrix},$$

"quantum2
2019/12/13
page 258

onde U_1, U_2 são reais, então

$$\frac{1}{tr(e^{-\beta \mathbf{H}})}\, e^{-\beta \mathbf{H}} = \begin{pmatrix} \frac{e^{-\beta U_1}}{e^{-\beta U_1}+e^{-\beta U_2}} & 0 \\ 0 & \frac{e^{-\beta U_2}}{e^{-\beta U_1}+e^{-\beta U_2}} \end{pmatrix}$$

Seja A diagonal da forma

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}.$$

Então,

$$\rho(A) = tr(\frac{1}{tr(e^{-\beta \mathbf{H}})}\, e^{-\beta \mathbf{H}}\ A) =$$

$$\frac{e^{-\beta U_1}}{e^{-\beta U_1}+e^{-\beta U_2}}\, A_1 + \frac{e^{-\beta U_2}}{e^{-\beta U_1}+e^{-\beta U_2}}\, A_2.$$

Mais uma vez confirmamos que o setting da Mecânica Estatística Clássica esta contido no setting da Mecânica Estatística Quântica através das matrizes diagonais.

Ainda, se A é denotada por

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix},$$

então

$$\rho(A) =$$

$$\frac{e^{-\beta U_1}}{e^{-\beta U_1}+e^{-\beta U_2}}\, A_{11} + \frac{e^{-\beta U_2}}{e^{-\beta U_1}+e^{-\beta U_2}}\, A_{22}.$$

Mais geralmente, na C^*-Algebra das matrizes n por n complexas, considere $\sigma_t = e^{i\,t\,H}$, onde H é matriz diagonal com entradas $U_1, U_2, ..., U_d$ reais. Então o C^*-estado KMS ρ à temperatura β é

$$\rho(A) = A_{1\,1}\rho_1 + A_{2\,2}\rho_2 + ... + A_{d\,d}\rho_d,$$

onde $\rho_i = \frac{e^{-\beta U_i}}{\sum_{j=1}^d e^{-\beta U_j}}$, $i = 1, 2, ..., d$.

Este operador densidade é a versão quantica das medidas de Gibbs da Mecânica Estatística.

Um outro exemplo - mais complexo - de conexão entre estados de Gibbs e C^*-algebras é descrito em [144]. Os trabalhos [113], [118][114],

[144] e [238] apresentam varios resultados ligando estados KMS de C^* Algebras com medidas de Gibbs do Formalismo Termodinâmico. Resultados sobre C^*-Algebras related to Fock spaces, Bosons and Fermions can be found in [118] and [275]

Vamos descrever uma outra forma de encontrar o estado de Gibbs quântico obtido acima mas agora via a maximização da pressão. Este resultado é analogo ao correspondente do Formalismo Termodinâmico. Na seção 2.8 vamos abordar esta questão no setting da Mecânica Estatística.

Abaixo vamos tratar de questões importantes da assim chamada Mecânica Estatística Quântica.

Seja ρ uma matriz densidade fixada, então sua entropia de von Neumann é dada por

$$0 \leq h(\rho) = -tr(\rho \log \rho).$$

Vamos mostrar que fixado um operador autoadjunto B agindo em $\mathbb{C}^n$ então a função F dada por

$$X \to F(X) = tr(XB) + h(X)$$

é maximizada por $X_0 = \frac{e^B}{tr(e^B)}$.

X_0 seria chamado operador densidade KMS associado ao operador B.

A partir do Lemma 4 section 3 in [162] (ou, Theorem 11.9 em [285]) obtemos: se $f(z)$ é analítica na variável z, então se A e B são autoadjuntas agindo em $\mathbb{C}^n$ temos

$$\frac{d}{dt} tr f(A + tB)|_{t=t_0} = tr(B\, f'(A + t_0 B)).$$

Fixado um operador autoadjunto B considere uma matriz densidade variável X e a função F dada por

$$X \to F(X) = tr(XB) + h(X) \in \mathbb{R}.$$

Na notação anterior teremos que este B vai corresponder a $B = -\beta\, \mathbf{H}$.

Qual o valor máximo de $F(X)$ quando X varia nas matrizes densidade? Este valor máximo é denominado de pressão de B.

Como o conjunto dos operadores densidade é compacto existe o supremo. Poderiam ocorrer autovalores nulos para tal maximizante? Vamos mostrar que o maximo é realizado por uma matriz densidade X_0 com autovalores estritamente positivos.

De fato, considere $P_1, P_2, ..., P_n$ operadores projeção tais que $\sum_{j=1}^n P_j = I$.

Dados $0 \leq \lambda_j$, $j = 1, 2, ..., n$, tais que, $\sum_{j=1}^n \lambda_j = 1$, então temos que $\sum_{j=1}^n \lambda_j P_j$ descreve um operador densidade geral.

Note que

$$F(\sum_{j=1}^n \lambda_j P_j) = \sum_{j=1}^n \lambda_j tr(P_j B) - \sum_{j=1}^n \lambda_j \log(\lambda_j).$$

Portanto, temos para um i fixado que

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_i} F(\sum_{j=1}^n \lambda_j P_j) \mid_{\lambda_i=0} = (Tr(P_i B) - 1) - \log(\lambda_i) \mid_{\lambda_i=0} = \infty.$$

Desta forma não podemos ter $\lambda_i = 0$, $i = 1, 2..., n$, para o operador densidade maximizante.

Assim, por argumentos de compacidade existe tal X_0 com autovalores todos positivos.

Como caracterizar X_0?

Considere variações de X_0 dada por $X_0 + tZ$, onde Z é autoadjunta com traço zero e $t \in \mathbb{R}$ é pequeno. Note que como X_0 tem todos autovalores positivos então para t pequeno $X_0 + tZ$ é operador densidade.

Na derivação de

$$\frac{d}{dt} F(X_0 + tZ) = \frac{d}{dt} tr((X_0 + tZ)\, B) + h(X_0 + tZ)$$

o primeiro termo é fácil de controlar. De fato, $tr((X_0 + tZ)\, B) = tr(X_0\, B) + t\ tr\,(Z\, B)$, e assim $\frac{d}{dt} tr((X_0 + tZ)\, B) = tr\,(Z\, b)$.

Para o outro termo note que $f(z) = z \log(z)$ tem derivada $1 + \log(z)$.

Em função da maximização de X_0 e pelo resultado mencionado acima, para um Z com traço zero qualquer, temos que

$$0 = \frac{d}{dt} F(X_0 + tZ)|_{t=0} = tr(Z\, B) - tr(Z\,(I + \log(X_0)) =$$

$$tr(Z\, B) - tr(Z \log(X_0)).$$

Fica assim caraterizada a matriz X_0

Isto implica que $B - \log X_0 = cI$, para algum c real. De fato, considere a decomposição espectral de $C = B - \log X_0$. Se houvessem dois autovalores distintos de C, digamos λ_i e λ_j, considere Z (com mesma decomposiçao em autovetores) e tal que é igual a multiplicação por 1 e -1 nos correspondentes autovetores (i e j) que são associados ao dois autovalores distintos λ_i e λ_j. Assuma que Z é tal que tem autovalores zero associados aos outros autovetores de $B - \log X_0$ (distintos de i e j). Neste caso Z tem traço zero, mas $tr(Z\,C) = \lambda_i - \lambda_j \neq 0$. Contradição. Logo, $B - \log X_0 = cI$.

Portanto, $X_0 = \frac{e^{B-c\,I}}{tr(e^{B-c\,I})} = \frac{e^B}{tr(e^B)}$.

2.7 Lattices de spins quânticos e teleporte

Referencias abrangentes sobre os assuntos tratados aqui nesta seção são [309], [112], [274], [259].

No apendice ao fim desta seção falaremos brevemente sobre Informação Quântica. Uma excelente referencia sobre este assunto é [39] (ver também [192] e [18]).

Resultados recentes sobre spin lattices aparecem em [50], [51], [49] e [48].

Consideramos em $\mathbb{C}^N$ o produto interno usual.

Um site clássico, por exemplo, seria da forma

$$\{+,-\} \times \{+,-\} \times \{+,-\} \times ... \times ...,$$

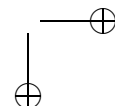
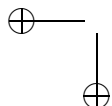
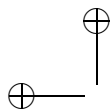
onde $+$ representa carga positiva e $-$ carga negativa.

Ou seja, neste caso usamos o produto carteziano.

Vamos agora considerar o setting quântico.

Denote por D_N o conjunto das matrizes densidade sobre $\mathbb{C}^N$. Ainda, denote por M_N o espaço de Hilbert complexo das matrizes de dimensão N.

Suponha, por exemplo, que num site do lattice quântico sobre $\mathbb{N}$ tenhamos em cada site dois spins $|+>$ e $|->$. Neste caso, em cada site, $|+>$ e $|->$ são dois vetores em $\mathbb{C}^2$.

Um estado seria algo da forma $v = c_1|+> + c_2|->$, onde $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$ e $|v| = 1$.

Vamos considerar o sistema composto de varios spins

$$v_1 \otimes v_2 \otimes v_3 \otimes ... \otimes v_n \otimes ... \in (\mathbb{C}^2)^{\mathbb{N}}.$$

Um observavel L poderia ser dado pela expressão

$$v_1 \otimes v_2 \otimes ... \otimes v_n \otimes ... \to L_1(v_1) \otimes L_2(v_2) \otimes ... \otimes L_n(v_n) \otimes ....$$

onde L_j, $j = 1, 2, ..n, ..$, seria uma sequencia de operadores autoadjuntos (matrizes) agindo em $\mathbb{C}^2$.

Suponha que do lado a bem esquerda tenhamos dois sites descritos por $v_1 \otimes v_2$.

No sistema composto devemos descrever as probabilidades das quatro possibilidades

$$|+> \otimes |+>, \quad |+> \otimes |->, \quad |-> \otimes |+>, \quad |-> \otimes |-> .$$

Matrizes em $M_2 \otimes M_2$ agem de forma natural nestes vetores (que podem ser considerados como em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$).

Do ponto de vista de Heisenberg é tambem natural considerar

$$(a_1 \otimes a_2 \otimes a_3 ...) \in (M_2)^{\otimes \mathbb{N}},$$

onde a_j são operadores densidade $a_j : \mathbb{C}^2 \to \mathbb{C}^2$.

Como vimos, pelo Postulado 9, para entender a questão devemos considerar o produto tensorial de operadores $a_1 \otimes a_2 \in M_2 \otimes M_2$.

Se fossemos considerar três sites deveríamos tomar o produto tensorial de tres matrizes, que estaria em $M_2 \otimes M_2 \otimes M_2 = (M_2)^{\otimes 3}$, e, no caso de k sites: $\underbrace{M_2 \otimes M_2 \otimes ... \otimes M_2}_{k} = M_2^{\otimes k}$.

É possível formalizar matematicamente o produto tensorial infinito $(\mathbb{C}^N)^{\otimes \mathbb{N}} = \mathbb{C}^N \otimes \mathbb{C}^N \otimes ... \otimes \mathbb{C}^N \otimes ...$, $N \in \mathbb{N}$ (conforme descrito abaixo). Da mesma forma, o produto infinito $(M_N)^{\otimes \mathbb{N}}$. Um elemento nesta última C^*-Algebra age em $(\mathbb{C}^N)^{\otimes \mathbb{N}}$. Referimos o leitor para [112], [52] e [286] para este tópico. O espaço $(\mathbb{C}^N)^{\otimes \mathbb{N}}$ desempenha na teoria dos spins lattices quânticos o papel do shift de Bernoulli (ver seção 2.8). Só que no presente setting se pode falar em interferência quântica entre sites vizinhos do lattice. Observamos que, como vamos considerar aqui apenas potenciais que dependem de finitas coordenadas, o entendimento anterior dos produtos finitos $(\mathbb{C}^N)^{\otimes k} = \underbrace{\mathbb{C}^N \otimes \mathbb{C}^N \otimes ... \otimes \mathbb{C}^N}_{k}$, $k \in \mathbb{N}$, será suficiente para os fins aqui desejado.

Dado um espaço vetorial complexo com produto interno é sempre possível considerar seu fecho com respeito a $|\,.\,| = \sqrt{< .,. >}$, ou seja, considerar seu completamento como espaço métrico [112], [300] [223] [112].

Considere uma C^*-Algebra $\mathcal{H}$ e a seguir o espaço vetorial das combinações lineares finitas de elementos da forma $v_1 \otimes v_2 \otimes v_3 \otimes ... \otimes v_n \otimes ...$, onde todos os $v_j \in \mathcal{H}$ são tais que, a menos de um número finito, são iguais o elemento neutro multiplicativo 1. Um produto interno fica naturalmente definido neste espaco.:

Seja $v = v_1 \otimes v_2 \otimes v_3 \otimes ... \otimes v_n \otimes ...$ e $u = u_1 \otimes u_2 \otimes u_3 \otimes ... \otimes u_n \otimes ...$, tome então $< v, u >=< v_1, u_1 >< v_2, u_2 > \, ... < v_k, u_k >$, onde k é o menor indice para u e v tais que, a partir dali os indices maiores que k são iguais a 1.

O fecho deste espaço vetorial é por definição $\mathcal{H}^{\otimes \mathbb{N}}$. Referimos o leitor para mais detalhes a [259] e [52].

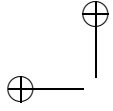
Quando falarmos em operador dual, ou afirmarmos que o operador

$$(a_1 \otimes a_2 \otimes a_3 ...) : \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes ... \to \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes ...$$

é autoadjunto, positivo, etc.. será em relação ao produto interno descrito acima.

A operação algébrica em $(M_n)^{\otimes \mathbb{N}}$ é dada por

$$(a_1 \otimes a_2 \otimes a_3 ...)\,(b_1 \otimes b_2 \otimes b_3 ...) = (a_1 \circ b_1) \otimes (a_2 \circ b_2) \otimes (a_3 \circ b_3)....,$$

qualquer $(a_1 \otimes a_2 \otimes a_3 ...)\,,\,(b_1 \otimes b_2 \otimes b_3 ...) \in (M_N)^{\otimes \mathbb{N}}$.

Esta é a maneira de descrever um lattice unidimensional quântico com N spins.

Lembre que o operador identidade I deve ser entendido como o observável ”não observar”.

Seja $\mathbb{A}$ a C^*-Algebra $(M_2)^{\otimes \mathbb{N}}$. O produto tensorial infinito é tratado com muitos detalhes em [259].

Vamos agora considerar uma classe de operadores $L : \mathbb{A} \to \mathbb{A}$, tais que $L(a)$ é positivo se a é positivo. Nosso objetivo neste momento é apresentar alguns exemplos interessantes e fazer um paralelo com o setting de Formalismo Termodinâmico que será analisado na próxima seção.

Considere um operator $\phi : M_2 \to \mathbb{C}$ tal que $\phi_{\tilde{b}}(a) = \phi(a) =$ traço $(\tilde{b}a)$, para algum $\tilde{b}$ positivo com traço 1.

Defina

$$L(a_1 \otimes a_2 \otimes a_3 ...) = \phi(a_1)\, a_2 \otimes a_3 \otimes a_4 \otimes a_5 ... = b_1 \otimes b_2 \otimes b_3 ... \in \mathcal{A}.$$

Se todos os a_j são positivos, então, todos os b_j são positivos.

Como se sabe o assim chamado traço 1 se define da seguinte forma, dadas duas matrizes R e S em M_N

$$Tr_1(R \otimes S) = Tr(R)\; S \in M_N,$$

onde $Tr(R)$ é o traço de R (para mais detalhes ver [285], [260] ou [264]).

Note Tr_1 é bilinear. Observe ainda que se R e S forem operadores densidade então $Tr_1(R \otimes S) = \; S$.

Defina para $a_1 \otimes a_2 \otimes a_3 ...$ na C^*-Algebra $\mathcal{A} = (M_N)^{\otimes \mathbb{N}}$

$$L(a_1 \otimes a_2 \otimes a_3 ...) = Tr_1(a_1 \otimes a_2) \otimes a_3 \otimes a_4 \otimes a_5 ... = b_1 \otimes b_2 \otimes b_3 ... \in \mathcal{A}.$$

Vamos apresentar um $L : (M_2)^{\otimes \mathbb{N}} \to (M_2)^{\otimes \mathbb{N}}$ de forma ainda mais geral do que o acima apresentado, considere primeiro, $\epsilon : M_2 \times M_2 \to M_2$, da forma

$$\epsilon(a_1 \otimes a_2) \;=\; Tr_1(\sum_{j=1}^{N} K_j^*\, (a_1 \otimes a_2)\, K_j), \tag{2.9}$$

onde Tr_1 é o traço em relação ao primeiro fator (como acima), e $K_j \in M_2 \otimes M_2$, $j = 1, ..., N$. O operador K_j não precisa ser unitário.

Considere então L, obtido a partir deste ϵ, como

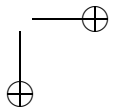
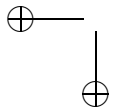
$$L_\epsilon(a_1 \otimes a_2 \otimes a_3 ...) = \epsilon(a_1 \otimes a_2) \otimes a_3 \otimes a_4 \otimes a_5 ... = b_1 \otimes b_2 \otimes b_3 ... \in \mathcal{A}$$

Note que se todos os a_j são positivos, então, todos os b_j são positivos.

Seja Φ um canal quantico levando $M_2 \otimes M_2$ em si mesmo. Podemos então definir o operador

$$L(a_1 \otimes a_2 \otimes a_3 \otimes a_4 \otimes ...) = (\Phi(a_1 \otimes a_2)\,) \otimes a_3 \otimes a_4 \otimes ...$$

Este tipo de operador aparece com frequencia na Teoria da Informação Quântica.

Aqui fica claro a importância de assumir que Φ é completamente positivo, pois isto assegura que se $a_1 \otimes a_2 \otimes a_3 \otimes a_4 \otimes ...$ for positivo,

então, como $\Phi \otimes I \otimes I \otimes ...$ é canal positivo (ver definição 2.10), segue que $(\Phi(a_1 \otimes a_2)) \otimes a_3 \otimes a_4...$ é operador positivo.

Afirmamos que as variadas definições acima são naturais e extendem a noção de certos conceitos clássicos.

Como veremos a seguir, estamos apresentando acima em (2.9) uma generalização da ação de uma matriz dois por dois agindo em um espaço vetorial de dimensão dois (ver [240]).

Considere uma matriz P with entradas reais postivas p_{ij}. Ou seja,

$$P \,=\, \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix}.$$

Considere agora para for $h = 1, 2$

$$\mathbb{P}_h = \begin{pmatrix} \sqrt{p_{h1}} & 0 \\ 0 & \sqrt{p_{h2}} \end{pmatrix}$$

Finalmente tome

$$K = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{P}_1 + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{P}_2,$$

e, considere

$$\epsilon(a_1 \otimes a_2) \,=\, Tr_1(K^* \,(a_1 \otimes a_2)\, K).$$

Se $a_2 = 1$ (a matriz identidade) e

$$a_1 = \begin{pmatrix} f_1 & 0 \\ 0 & f_2 \end{pmatrix},$$

então, fazendo algumas contas simples obtemos

$$Tr_1(K^* \,(a_1 \otimes a_2)\, K) = \begin{pmatrix} f_1\, p_{11} + f_2 p_{21} & 0 \\ 0 & f_1 p_{12} + f_2 p_{22} \end{pmatrix}.$$

Estamos assim descrevendo a ação da matriz P no vetor $\begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$.

Desta forma a ação de uma matriz está contida dentro do formalismo acima descrito. Para isto basta nos restringimos ao universo das matrizes diagonais (em que não existe o fenômeno da interferência).

O que acabamos de apresentar pode ser estendido a ação de L sobre $\mathbb{A} = (M_2)^{\otimes \mathbb{N}}$. O paralelo com a Mecânica Estatística, e, em particular, com o operador de Ruelle [289] (quando este depende de duas coordenadas) é transparente (ver seção 2.8).

A interação entre sites vizinhos no lattice de Bernoulli da próxima seção é descrita pela ação de uma matriz. Desta forma estamos aqui generalizando o setting da Mecânica Estatística.

Vamos agora descrever o formalismo geral da teoria dos lattices (ou cadeias) de spin quânticos. Referencias gerais sobre o assunto são [52] e [210].

Antes de mais nada uma questão de notação: um elemento genérico em $(\mathbb{C}^N)^{\otimes\mathbb{Z}}$ será denotado por

$$... \otimes a_{-2} \otimes a_{-1} \otimes a_0 \otimes a_1 \otimes a_2 \otimes ....$$

Algumas vezes se usa a notação

$$... \otimes a_{-2} \otimes a_{-1} \otimes \,|\, a_0 \otimes a_1 \otimes a_2 \otimes ....$$

O | que aparece acima serve apenas para dizer onde está o elemento que corresponde ao $0 \in \mathbb{Z}$.

Se fossemos considerar o shift σ agindo em $(\mathbb{C}^N)^{\otimes\mathbb{Z}}$, seria natural então escrever que para $x = ...\otimes a_{-2} \otimes a_{-1} \otimes \,|\, a_0 \otimes a_1 \otimes a_2 \otimes .... \in (\mathbb{C}^N)^{\otimes\mathbb{Z}}$ temos que $\sigma(x) \in (\mathbb{C}^N)^{\otimes\mathbb{Z}}$ é dado por

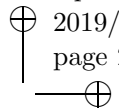
$$\sigma(...\otimes a_{-2} \otimes a_{-1} \otimes \,|\, a_0 \otimes a_1 \otimes a_2 \otimes ....) = ...\otimes a_{-2} \otimes \,|\, a_{-1} \otimes a_0 \otimes a_1 \otimes a_2 \otimes ....$$

O descrito acima se extende de maneira análoga para $(M_N)^{\otimes\mathbb{Z}}$.

Vamos descrever agora o que é um interação no setting de quantum spin lattices. Referimos o leitor para [42] e [67] para uma descrição dentro do setting de Mecânica Estatística.

Vamos denotar por Γ um subconjunto genérico de $\mathbb{Z}$.

Para um conjunto ordenado da forma $\Gamma = \{n, n+1, ..., n+k\}$, consideramos $\mathcal{A}_\Gamma = \mathcal{L}(\,(\mathbb{C}^N)^{\otimes\,(k+1)}\,)$, o conjunto dos operadores complexos sobre $(\mathbb{C}^N)^{\otimes\,(k+1)}$. Este é uma C^*-algebra quando consideramos $*$ a operação de tomar o adjunto.

Dado o conjunto $\Gamma = \{n, n+1, ..., n+k\}$, podemos associar de maneira natural o espaço $(\mathbb{C}^N)^{\otimes\,k+1}$ com um subespaço de $(\mathbb{C}^N)^{\otimes\,\mathbb{Z}}$. Isto será feito o tempo todo sem menção explícita. Desta forma $\mathcal{A}_\Gamma =$

$\mathcal{L}\,(\,(\mathbb{C}^N)^{\otimes \mathbb{N}} \otimes (\mathbb{C}^N)^{\otimes\,(k+1)} \otimes (\mathbb{C}^N)^{\otimes \mathbb{N}})$, onde colocamos a matriz I onde apropriado (para preencher os sites fora de Γ). Isto é, dado um operador $B\,:\,(\mathbb{C}^N)^{\otimes\,(k+1)} \to (\mathbb{C}^N)^{\otimes\,(k+1)}$, associamos a ele o operador $I^{\otimes\,\mathbb{N}} \otimes B \otimes I^{\otimes\,\mathbb{N}}$.

Desta forma, se $\Gamma_1 \subset \Gamma_2$, então podemos dizer que $\mathcal{A}_{\Gamma_1} \subset \mathcal{A}_{\Gamma_2}$.

Para um conjunto da forma

$$\Gamma = \{n_1, n_1+1, ..., n_1+k_1\} \cup \{n_2, n_2+1, ..., n_2+k_2\},$$

onde $n_1+k_1 < n_2$, nós consideramos

$$\mathcal{A}_\Gamma = \mathcal{L}((\mathbb{C}^N)^{\otimes\,(k_1+1)} \otimes (\mathbb{C}^N)^{\otimes\,(k_2+1)}\,)\,,$$

ou, altenativamente, o identificado associado

$$\mathcal{A}_\Gamma = \mathcal{L}((\mathbb{C}^N)^{\otimes\,\infty} \otimes (\mathbb{C}^N)^{\otimes\,(k_1+1)} \otimes (\mathbb{C}^N)^{\otimes\,n_2-(n_1+k_1)} \otimes (\mathbb{C}^N)^{\otimes\,(k_2+1)}\,) \otimes (\mathbb{C}^N)^{\otimes\,\infty}.$$

Para outros conjuntos Γ definimos $\mathcal{A}_\Gamma$ de forma similar.

Denotamos por $\mathcal{A}$ o completamento de $\cup_\Gamma \mathcal{A}_\Gamma$. Qualquer questão envolvendo $\mathcal{A}$ será reduzida a análise dos $\mathcal{A}_\Gamma$ individuais.

Observe que é necessário considerar uma métrica acima para então obter seu completamento. Isto é descrito com todo cuidado e correção na seção 3.2 em [259].

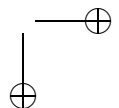
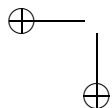
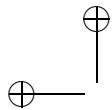
Considere fixado $H : C^N \otimes C^N \to C^N \otimes C^N$, que vai desempenhar o papel de um Hamiltoniano, e que vai descrever uma interação de vizinhos no lattice $(C^N)^{\otimes \mathbb{Z}}$. Vamos considerar em breve transladados (via shift) deste operador agindo no site. Na verdade se pode considerar casos bem mais gerais, mas entendemos que, para o melhor entendimento, é preferível considerar primeiro alguns exemplos simplificados. Depois. apresentaremos a definição geral.

Vamos supor que este $H\,:\,C^N \otimes C^N \to C^N \otimes C^N$ esta associado ao $\Gamma_\alpha = \{0,1\} \subset \mathbb{Z}$. Desejamos estender sua ação ao conjunto $\Gamma_\beta = \{0,1,2\} \subset \mathbb{Z}$.

Denotamos $H = H_{\Gamma_\alpha} : (\mathbb{C}^N)^{\otimes\,2} \to (\mathbb{C}^N)^{\otimes\,2}$. Vamos agora descrever o correspondente H_{Γ_β}

$$H_{\Gamma_\beta} : (\mathbb{C}^N)^{\otimes\,3} \to (\mathbb{C}^N)^{\otimes\,3}.$$

É natural considerar

$$H_{\Gamma_\beta}(x_n \otimes x_{n+1} \otimes x_{n+2}) =$$

$$(H(x_n \otimes x_{n+1}) \otimes x_{n+2}) + (x_n \otimes H(x_{n+1} \otimes x_{n+2})).$$

A expressão acima descreve o que seria a generalização natural do setting considerado no Formalismo Termodinâmico (conforme o que vamos apresentar na próxima seção) para um potencial de interação que depende de duas coordenadas no espaço de Bernoulli. A diferença é que no presente setting o produto tensorial captura as interferências quânticas entre vizinhos no site. Vamos apresentar alguns exemplos explícitos abaixo.

As matrizes de Pauli são

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_2 = \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

e

$$\sigma_3 = \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

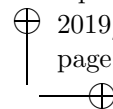
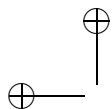
Junto com a matriz identidade $I = \sigma_0$ as matrizes de Pauli formam uma base para as matrizes dois por dois auto-adjuntas (usando coeficientes reais). Isto é, para toda matriz complexa autoadjunta dois por dois A existem numeros reais a_0, a_1, a_2, a_3 tais que

$$A = a_0 I + a_1 \sigma_1 + a_2 \sigma_2 + a_3 \sigma_3.$$

Além disto, para toda matriz complexa dois por dois A existem numeros complexos a_0, a_1, a_2, a_3 tais que

$$A = a_0 I + a_1 \sigma_1 + a_2 \sigma_2 + a_3 \sigma_3.$$

As quatro formam uma base ortonormal para o conjunto das matrizes complexas dois com o produto interno $< A, B >= \text{Tr}\ (A\, B^*)$.

Propriedades gerais sobre estas matrizes podem ser encontradas em [264]. A relação destas matrizes e o experimento de Stern Gerlach tem uma boa exposição em [313].

A esfera de Bloch é o conjunto

$$B_3 = \{x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 \,|\, x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \leq 1\}.$$

Existe uma bijeção da esfera de Bloch com as matrizes densidade complexas dois por dois. A cada x em B_3 se associa a matriz

$$\frac{1}{2}(I \,+\, x_1\sigma_1 \,+\, x_2\sigma_2 \,+\, x_3\sigma_3).$$

Os estados puros seriam as projeções sobre vetores $\psi = (z_1, z_2) \in \mathbb{C}^2$ de norma 1, que por sua vez estão em bijeção com os elementos $x = (x_1, x_2, x_3)$ tais que $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1$. Assim, os estados puros podem ser visualizados como a fronteira da esfera de Bloch

Para mais detalhes sobre esta propriedade referimos o leitor a [54].

Algumas propriedades das matrizes de Pauli são $\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = I = \sigma_0$.

Ainda, $\sigma_1\,\sigma_2 = i\,\sigma_3$, $\sigma_2\,\sigma_3 = i\,\sigma_1$, $\sigma_2\,\sigma_1 = -i\,\sigma_3$.

Observe que det $(\sigma_j) = -1$ e traço $(\sigma_j) = 0$ para todo $j = 1, 2, 3$.

Os autovalores tomam apenas os valores 1 e -1.

$\frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)$ e $\frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)$ são os autovetores correspondentes a σ_x.

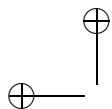
$\frac{1}{\sqrt{2}}(1,i)$ e $\frac{1}{\sqrt{2}}(1,-i)$ são os autovetores correspondentes a σ_y.

$(1,0)$ e $(0,1)$ são os autovetores correspondentes a σ_z.

Como exemplo do uso das matrizes de Pauli considere $x_1 \otimes x_2$, e vamos nele aplicar o operador $C = (\sigma_x \otimes \sigma_x) + (\sigma_x \otimes I)$ agindo $(\mathbb{C}^2)^{\otimes 2}$, obtendo assim

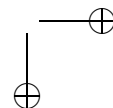
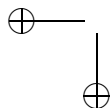
$$C(x_1 \otimes x_2) = [\,(\sigma_x \,\otimes\, \sigma_x) + (\sigma_x \otimes I)\,](x_1 \otimes x_2) =$$

$$[\,(\sigma_x(x_1) \,\otimes\, \sigma_x(x_2)) + (\sigma_x(x_1) \otimes x_2)\,] =$$

$$\sigma_x(x_1) \,\otimes\, (\sigma_x(x_2) + x_2)\,.$$

Este vetor não está emaranhado.

Outro exemplo: considere $x_1 \otimes x_2 \otimes x_3$ e vamos aplicar nele o operador C que age em $(\mathbb{C}^2)^{\otimes 3}$. Assim, se obtem

$$C(x_1 \otimes x_2 \otimes x_3) =$$

$$[\,(\sigma_x \,\otimes\, \sigma_x \otimes I) + (I \otimes \sigma_y \,\otimes\, \sigma_y)\,](x_1 \otimes x_2 \otimes x_3) =$$

$$(\sigma_x(x_1) \otimes \sigma_x(x_2) \otimes x_3) + (x_1 \otimes \sigma_y(x_2) \otimes \sigma_y(x_3)).$$

Pode se mostrar que o vetor acima em $(\mathbb{C}^2)^{\otimes 3}$ é emaranhado.

Vamos voltar agora ao setting mencionado antes onde consideramos transladados (via shift).

Exemplo 2.6. (O modelo XY quântico) Se

$$H_{\{0,1\}} = H = (\sigma_x \otimes \sigma_y - \sigma_y \otimes I) : (\mathbb{C}^2)^{\otimes 2} \to (\mathbb{C}^2)^{\otimes 2},$$

então vamos definir, como descrito acima,

$$H_{\{0,1,2\}} : (\mathbb{C}^2)^{\otimes 3} \to (\mathbb{C}^2)^{\otimes 3}.$$

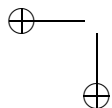
Dado $x_1 \otimes x_2 \otimes x_3 \in (\mathbb{C}^2)^{\otimes 3}$ considere

$$H^{\Phi}_{\{0,1,2\}}(x_1 \otimes x_2 \otimes x_3) =$$

$$(\sigma_x \otimes \sigma_y \otimes I - \sigma_y \otimes I \otimes I)(x_1 \otimes x_2 \otimes x_3) +$$

$$(I \otimes \sigma_x \otimes \sigma_y - I \otimes \sigma_y \otimes I)(x_1 \otimes x_2 \otimes x_3) =$$

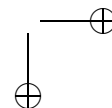
$$\sigma_x(x_1) \otimes \sigma_y(x_2) \otimes x_3 - \sigma_y(x_1) \otimes x_2 \otimes x_3 +$$

$$x_1 \otimes \sigma_x(x_2) \otimes \sigma_y(x_3) - x_1 \otimes \sigma_y(x_2) \otimes x_3$$

Uma interação Φ no lattice quântico $(\mathbb{C}^N)^{\otimes \mathbb{Z}}$ é uma escolha de um operador autoadjunto $H^{\Phi}_{\Gamma} = H_{\Gamma} \in \mathcal{A}_{\Gamma} = (C^N)^{\otimes (\#\Gamma)}$ para cada conjunto finito $\Gamma \subset \mathbb{Z}$. Se a escolha definida por Φ for muito geral não se consegue obter resultados que sejam calculáveis de forma simples. Vamos então considerar algumas restrições naturais abaixo.

Sendo assim $\Phi = (\Phi_{\Gamma})_{\Gamma \subset \mathbb{Z}}$, definido para todo conjunto finito Γ denota uma interação.

Dado um elemento $j \in \mathbb{Z}$ denote τ_j o operator tal que para o conjunto finito $\Gamma = \{n, n+1, ..., n+k\}$, a transformação $\tau_j : \mathcal{A}_{\{n,n+1,...,n+k\}} \to \mathcal{A}_{\{n+j,n+j+1,...,n+j+k\}}$, é a identificação natural.

Definição 2.22. Diz-se que a interação Φ é invariante por translação se para qualquer Γ e qualquer $a \in \mathbb{Z}$, temos que

$$\Phi(\Gamma + a) = \tau_a(\Phi(\Gamma)).$$

Algumas hipóteses técnicas mais são necessárias para definir o que se chama uma interação (ver [210]) mas para simplificar a questão vamos nois restringir ao colocado acima.

Vamos apresentar agora um exemplo que descreve o caso típico de interação Φ invariante por translação.

Considere fixado o operador autoadjunto $A : (\mathbb{C}^N)^{\otimes 2} \to (\mathbb{C}^N)^{\otimes 2}$.

Para conjuntos da forma $\Gamma = \{n, n+1\}$, tomamos $H_\Gamma^\Phi = A$.

Para conjuntos da forma $\Gamma = \{n, n+1, n+2\}$, tomamos

$$H_\Gamma^\Phi : (\mathbb{C}^N)^{\otimes 3} \to (\mathbb{C}^N)^{\otimes 3},$$

através da expressão

$$H_\Gamma^\Phi(x_n \otimes x_{n+1} \otimes x_{n+2}) =$$

$$(A(x_n \otimes x_{n+1}) \otimes x_{n+2}) + (x_n \otimes A(x_{n+1} \otimes x_{n+2})).$$

Uma notação simplificada seria

$$H_\Gamma^\Phi(x_n \otimes x_{n+1} \otimes x_{n+2}) = A(x_n \otimes x_{n+1}) + A(x_{n+1} \otimes x_{n+2}).$$

Mas, de maneira mais formal, preferimos escrever

$$H_\Gamma^\Phi(x_n \otimes x_{n+1} \otimes x_{n+2}) = [A(x_n \otimes x_{n+1}) \otimes I] + [I \otimes A(x_{n+1} \otimes x_{n+2})].$$

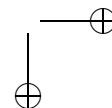
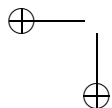
Agora, para os conjuntos mais gerais da forma $\Gamma = \{n, n+1, ..., n+k\}$, tomamos

$$H_\Gamma^\Phi(x) = \sum_{j=0}^{k-1} I^{\otimes j} \otimes A(x_{n+j} \otimes x_{n+j+1}) \otimes I^{\otimes (k-j-1)}.$$

Desta forma $H_\Gamma^\Phi : (\mathbb{C}^N)^{\otimes (k+1)} \to (\mathbb{C}^N)^{\otimes (k+1)}$.

Para conjuntos Γ que tem forma distinta do acima, definimos $H_\Gamma^\Phi = I$. Por exemplo, se o conjunto Γ só tem um elemento entao $H_\Gamma^\Phi = I$.

O Φ assim definido é invariante por translações. Esta interação Φ foi obtida a partir de um Hamiltoniano básico A. Dizemos neste caso que o potencial depende de duas coordenadas no site.

Para cada conjunto Γ fixado podemos considerar o homorfismo de grupo $b \to \sigma_t(b) = e^{t\,i\,H_\Gamma}\, b\, e^{-t\,i\,H_\Gamma}$, $t \in \mathbb{R}$, onde $b \in (\mathbb{C}^N)^{\otimes \#\Gamma}$. Este

grupo a um parâmetro σ_t desempenha papel fundamental na teoria e permite definir o estado KMS associado a H.

Um exemplo interessante é o seguinte: considere $H = \sigma_x \otimes \sigma_y$ e $U = e^{i\,H} = e^{i\,\sigma_x \otimes \sigma_y}$.

Vamos calcular $U = e^{i\,H}$.

As relações $\sigma_x \circ \sigma_x = I$ and $\sigma_y \circ \sigma_y = I$ são úteis.

Assim,

$$U = e^{i\,\sigma_x \otimes \sigma_y} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{i^j}{j\,!}\,(\sigma_x \circ \sigma_y)^j = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{i^j}{j\,!}\,(\sigma_x^j \circ \sigma_y^j) =$$

$$\cos(1)\,(I \otimes I) \,+\, i\,\sin(1)\,(\sigma_x \otimes \sigma_y) = .$$

Ainda,

$$U^* = e^{-i\,\sigma_x \otimes \sigma_y} = \cos(1)\,(I \otimes I) \,-\, i\sin(1)\,(\sigma_x \otimes \sigma_y).$$

Generalizando o que foi descrito acima se pode calcular explicitamente o σ_t, $t \in \mathbb{R}$, associado a tal H

Fixado o aparato descrito acima, o objetivo é encontrar algum estado $\rho \in (C^N)^{\otimes \mathbb{Z}}$ que seja invariante por translação. Também faz sentido perguntar sobre estados KMS neste caso (para definições ver Appendix A em [210], [290], [269], [52]) and [118], analisando cada conjunto Γ possível. Referimos o leitor as referências apresentadas aqui para maiores detalhes. Este conceito de estado invariante generaliza aquele da Mecânica Estatística.

É possivel iniciar um procedimento análogo ao acima com um operador autoadjunto $A : (\mathbb{C}^N)^{\otimes 3} \to (\mathbb{C}^N)^{\otimes 3}$. Deixamos isto a cargo do leitor.

Este é um potencial que depende de três coordenadas no site. Neste caso, se o conjunto Γ só tem um ou dois elemento entao $H_\Gamma^\Phi = I$.

Exemplo 2.7. (O modelo XY geral) Seja $A : (\mathbb{C}^2)^{\otimes 2} \to (\mathbb{C}^2)^{\otimes 2}$ dado

$$A = -\,[\,(\sigma_x \,\otimes\, \sigma_x + \sigma_y \,\otimes\, \sigma_y)\,\cos(\alpha) +$$

$$(\sigma_x \,\otimes\, \sigma_y + \sigma_y \,\otimes\, \sigma_x)\,\sin(\alpha)\,] \,-\gamma\sigma_y -\, \delta\sigma_z =$$

$$-\,[\,(\sigma_x \,\otimes\, \sigma_x + \sigma_y \,\otimes\, \sigma_y)\,\cos(\alpha) +$$

$$(\sigma_x \otimes \sigma_y + \sigma_y \otimes \sigma_x)\,\sin(\alpha)\,] - \gamma(\sigma_y \otimes I) - \delta(\sigma_z \otimes I),$$

onde γ, α, δ são numeros reais.

Podemos obter a partir do apresentado acima uma interação invariante por translações de forma análoga ao descrito anteriormente.

Este exemplo, que é bastante estudado na literatura, é denominado de modelo XY quântico de Fukui and Origuchi (ver [129]). Este modelo generaliza, num certo sentido, o assim chamado modelo XY da Mecânica Estatística (ver [26]).

Na notação usual de alguns trabalhos em Física, o que afirmamos acima pode ser descrito como uma interação $\tilde{\Phi} = (\tilde{\Phi}_\Gamma)$, pela expressão

$$\tilde{\Phi}_\Gamma = \begin{cases} -[\sigma_x^n \sigma_x^{n+1} + \sigma_y^n \sigma_y^{n+1}]\cos\alpha - [\sigma_x^n \sigma_y^{n+1} + \sigma_y^n \sigma_x^{n+1}]\sin\alpha, & \text{if } \Gamma = \{n, n+1\}; \\ -\gamma\sigma_y^n - \delta\sigma_z^n, & \text{if } \Gamma = \{n\}; \\ I, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Como dissemos antes, a ação de um Hamiltoniano no lattice quântico, no qual existem interferêcias entre as diferentes possibilidades, requer o uso do produto tensorial para o seu correto equacionamento. Referimos o leitor a observação 2.1 na próxima seção onde explicamos a diferença do setting da Mecânica Estatística Clássica e do setting da Mecânica Estatística Quântica.

Em [239] [48] são apresentados uma análise de propriedades de estados KMS em certos quantum spin lattices e sua relação com probabilidades invariantes no espaço de Bernoulli.

Alguns exemplos de operadores agindo em sistemas compostos

Se considerarmos o operador densidade associado a projeção sobre ψ ele tera entropia zero porque é uma projeção.

O estado ψ projetado na primeira variável será

$$\frac{|0>}{\sqrt{2}} + \frac{|1>}{\sqrt{2}}$$

que tem para nossa surpresa a entropia $\log 2$ que é a máxima possível. O mesmo acontece com realação a segunda variável.

No sistema composto vamos considerar agora uma medição somente na primeira variável, por exemplo, medir σ^x quando o estado é ψ.

Qual seria o valor esperado desta medição quando o estado é ψ? Neste caso algumas vezes é usado na literatura a notação $E(\sigma^x)|_\psi$, quando seria mais apropriado escrever $E(\sigma^x \otimes I)|_\psi$. Mas como $\psi \in \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ a ambiguidade pode ser resolvida e comprendida pelo leitor.

Lembre que o produto interno em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ é dado por que

$$< \; a \otimes b \,|\, c \otimes d \; >=< \; (a \otimes b), (c \otimes d) >=< a, c > < b, d > .$$

Ora, então basta calcular

$$E(\sigma^x)|_\psi \; =< \psi|\,|\;(\;\sigma^x \otimes I\;)\;\psi > =$$
$$\frac{(\,0\,\otimes 0\,) + (\,1\,\otimes 1\,)}{\sqrt{2}}\,(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix})\,\frac{(\,0\,\otimes 0\,) + (\,1\,\otimes 1\,)}{\sqrt{2}} = 0.$$

Os possiveis valores da medição de σ^x seriam 1 (que corresponde a $|0>$) e -1 (que corresponde a $|1>$).

No sistema composto, as possiveis valores da medição de $\sigma^x \otimes I$ seriam 1 que corresponde aos auovetores $|0\,0>=|0>\otimes|0>$ e também a $|1\,1>=|1>\otimes|1>$, ou então, -1 que corresponde a $|0\,1>=|0>\otimes|1>$ e $|1\,1>=|1>\otimes|1>$.

Para calcular a probabilidade de se obter $|0>$ ao se medir σ^x na primeira coordenada do sistema composto e no estado ψ, observe que isto corresponde ao espaço gerado por $|0>\otimes|0>$ e $|0>\otimes|1>$.

Ora,

$$\psi = \frac{|0\,0>}{\sqrt{2}} + \frac{|1\,1>}{\sqrt{2}} =$$
$$1\,\frac{|0\,0>}{\sqrt{2}} + 1\,\frac{|1\,1>}{\sqrt{2}} + 0\,\frac{|0\,1>}{\sqrt{2}} + 0\,\frac{|1\,0>}{\sqrt{2}}.$$

Assim, probabilidade de se obter $|0>$ ao se medir σ^x na primeira coordenada do sistema composto e no estado ψ é igual a $1/2$.

É a mesma probabilidade de se obter $|1>$.

Observe que neste caso $\frac{|0\,0>}{\sqrt{2}}$ esta associado a probabilidade $1/2$. Vamos em breve voltar a tocar neste ponto ao falar de não localidade.

Suponha agora que desejamos medir ao mesmo tempo σ^x na primeira e na segunda variável. Qual seria a correlação do sistema, ou seja, qual o valor de $E_\psi(\sigma^x \otimes \sigma^x)$?

$$E(\sigma^x \otimes \sigma^x)|_\psi = < \psi| \, | \, (\, \sigma^x \otimes \sigma^x \,) \, \psi > =$$

$$\frac{(0 \otimes 0) + (1 \otimes 1)}{\sqrt{2}} (\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}) \frac{(0 \otimes 0) + (1 \otimes 1)}{\sqrt{2}} = 1.$$

Logo existe correlação entre as variáveis σ^x e σ^x.

Por outro lado

$$E(\sigma^x \otimes \sigma^z)|_\psi = < \psi| \, | \, (\, \sigma^x \otimes \sigma^z \,) \, \psi > =$$

$$\frac{(0 \otimes 0) + (1 \otimes 1)}{\sqrt{2}} (\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}) \frac{(0 \otimes 0) + (1 \otimes 1)}{\sqrt{2}} = 0.$$

Logo as variáveis σ^x e σ^z não estão correlacionadas.

Uma medição na primeira coordenada pode determinar o que acontece na segunda. Vamos elaborar sobre isto. Suponha que desejamos medir na primeira coordenada o $|0>$ (ou seja, via a análise do que acontece através da ação do operador $|0><0|$) quando o sistema esta no estado ψ descrito acima.

Assim, a probabilidade de se medir $|0>$ na primeira coordenada seria

$$< \psi| \, | \, (\, |0><0| \otimes I) \, \psi \; >=$$

$$\frac{(0 \otimes 0) + (1 \otimes 1)}{\sqrt{2}} (\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}) \frac{(0 \otimes 0) + (1 \otimes 1)}{\sqrt{2}} =$$

$$\frac{(0 \otimes 0)}{\sqrt{2}} (\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}) \frac{(0 \otimes 0)}{\sqrt{2}} +$$

$$\frac{(0 \otimes 0)}{\sqrt{2}} (\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}) \frac{(1 \otimes 1)}{\sqrt{2}} +$$

$$\frac{(1 \otimes 1)}{\sqrt{2}} (\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}) \frac{(0 \otimes 0)}{\sqrt{2}} +$$

$$\frac{(1 \otimes 1)}{\sqrt{2}} (\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}) \frac{(1 \otimes 1)}{\sqrt{2}} = 1/2.$$

Desta forma vamos obter $|0>$ ou $|1>$ na medição da primeira coordenada com igual probabilidade. Na verdade a medição vai determinar autovalores de $(\, |0><0| \otimes I)$ que correspondem ao dito acima. Os

possiveis autovalores de $(|0><0| \otimes I)$ seriam 0 ou 1. Lembre que $(0,0) \otimes (a,b)$ é sempre o elemento nulo em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$.

Note que $(0 \otimes 0)$ é autovetor de $(|0><0| \otimes I)$ associado ao autovalor 1. Como dissemos antes dado o operador $(|0><0| \otimes I)$ um medição resulta num autovalor. Se o output da medição no estado ψ foi o autovalor 1 então o estado colapsa e passa a ser $(0 \otimes 0)$ (conforme Postulado 4). Neste sentido podemos dizer que o resultado da medição resultou em $(0 \otimes 0)$ (porque obtivemos a medição 1)

Na eventualidade de se obter $|0>$ na medição o estado imediatamente passa a ser

$$(|0><0| \otimes I) |\psi> = (|0><0| \otimes I) \frac{(0 \otimes 0) + (1 \otimes 1)}{\sqrt{2}} = (0 \otimes 0).$$

Assim, a medição na primeira coordenada sendo feita e resultando $|0>$ então o que acontece na segunda está determinado. Este fenômeno está associado ao conceito de não localidade. Para mais detalhes referimos o leitor a [268].

Observe que se ψ nao fosse um vetor emaranhado tal fenomeno não poderia ocorrer. De fato, se $\psi = a \otimes b$, então

$$(|0><0| \otimes I) \ (a \otimes b) = (|0><0| (a) \otimes b.$$

A discussão acima é uma preparação para o que vem a seguir.

Apendice: Introdução a Informação Quântica

Ótimas referencias para a Teoria da Informação Quântica são: [285], [264], [39], [10], [356], [337], [65], [335], [18] e [269]. No paper [11] é descrito o uso de certo software que é util na teoria da Infomação Quantica. No site [204] é possível utilizar o computador quantico para realizar pequenas tarefas (utilizar portas lógicas).

Lembre que convencionamos que $|0> = (0,1)$ e $|1> = (1,0)$ (ambos elementos de $\mathbb{C}^2$). Eles são denominados de **qbits** em $\mathbb{C}^2$.

Nao confunda $|0>$ com o elemento neutro da soma que é $(0,0)$.

Na Teoria da Informação Clássica se considera dois bits denotados por + e − (um número finito de possibilidades). Vamos convencionar chamá-los respectivamente de 0 e 1. Na Teoria da Informação Quântica é importante analizar um sistema com dois qbits que são os $|0>$ e $|1>$ acima. Como um estado quântico genérico será a combinação $a\,|0> + b\,|1>$, $a, b \in \mathbb{C}$, um sistema desta natureza contempla um contínuo de

possibilidades o que permite em princípio um poder de processamento muito maior do que o clássico. Sistemas compostos desempenham um papel importante na teoria.

De outra forma: as possibilidades de combinação de $|+>$ e $|->$ é não enumerável e não apenas duas possibilidades $+$ e $-$ como no caso da Teoria da Informação Clássica.

Um sistema qbit que está no estado $\psi = a\,|0> \,+ b\,|1>$ tem probabilidade $|a|^2$ de ser medido o qbit $|0>$.

Por notação

$$|0\,0>=\,|0>\,\otimes |0>, \qquad |0\,1>=\,|0>\,\otimes |1>,$$

$$|1\,0>=\,|1>\,\otimes |0>, \qquad |1\,1>=\,|1>\,\otimes |1>.$$

Dado um certo estado $\psi = a\,|0> + b\,|1>$, $a, b \in \mathbb{C}$ podemos modificá-lo via ação de um operador unitário U e obter assim um novo estado $U(\psi)$. Não estamos fazendo com isto uma medição. Uma medição seria descrito pela ação de um operador autoadjunto $A = \sum_j \lambda_j P_{\phi_j}$. Ao medir por A o sistema no estado ψ se obtém como resultado um autovalor de A, digamos λ_2 . O estado ψ então colapsa no autovetor associado ϕ_2.

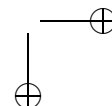
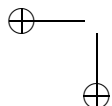
Varias operadores unitários U são utilizados em Informação Quântica para preparar um estado ψ transformado-o em algum outro $U(\psi)$. Tais operadores algumas vezes são chamados neste contexto de portas lógicas (ou, chaves).

Porta CNOT

CNOT é uma porta lógica que age no $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ de tal forma que se na primeira posição aparece um $|0>$ então não se altera o que está na segunda posição (nem na primeira). Mas, se aparece um $|1>$ na primeira posição então ele troca o que está na segunda (mas não na primeira).

Em termos matriciais a ação em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ é dada por

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Assim, CNOT $|0\,0>=|0\,0>$, CNOT $|0\,1>=|0\,1>$, CNOT $|1\,0>=|1\,1>$, CNOT $|1\,1>=|1\,0>$.

Considere o estado ψ no sistema composto

$$\psi = \frac{|0\,0 > + |1\,1 >}{\sqrt{2}} = \frac{(\,0 \otimes 0\,) + (\,1 \otimes 1\,)}{\sqrt{2}}$$

que como já vimos é emaranhado.

Note que CNOT $(\psi) = \frac{|0\,0> + |1\,0>}{\sqrt{2}}$.

Porta Hadamard

Considere $H : \mathbb{C}^2 \to \mathbb{C}^2$, descrito pela ação da matriz

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Neste caso,

$$H\,(|0>) = \frac{|0> + |1>}{\sqrt{2}},$$

$$H\,(|1>) = \frac{|0> - |1>}{\sqrt{2}}.$$

Teleporte

O objetivo é enviar com segurança de uma pessoa a outra a informação de um estado $\psi = a\,|0> + b\,|1>$. Lembre que o estado ψ é uma potencialidade e, na verdade, só podemos ter acesso ao módulo $|a|^2$ do estado "recebido" via a estatística obtida através de várias medições.

Vamos considerar um sistema composto $\Phi \in \mathcal{C}^2 \otimes \mathcal{C}^2 \otimes \mathcal{C}^2$ de 3 qbits preparado em um laboratório. Dois observadores que são denominados de Alice e Bob tem acesso parcial a certos bits do estado Φ.

O vetor $|\Phi>$ esta ordenado como $|A\,B\,C>$, assim A poderia ser $|0>$ ou $|1>$, mesma coisa individualmente para B e também para C.

Seja $\psi = a\,|0> + b\,|1>$ um estado fixado que vai ficar na posição A. É ele que desejamos transportar para Alice. Bob vai intervir no processo. Vamos necessitar usar várias portas lógicas no processo as quais irão operar sucessivamente num certo Φ particular.

Alice (que tem acesso apenas a C) - e que inicialmente não fará nenhuma medição - poderá, posteriormente a medição e uma posterior informação de Bob (que tem acesso apenas a BC) a Alice por telefone, receber um estado na posição C - e de alguma forma recuperar $\psi = a\,|0> + b\,|1>$.

Um espião não teria acesso ao ψ a ser enviado. Uma medição do eventual espião após a medição de Bob iria colapsar o estado. Isto seria detectado por Bob ou Alice. Esta afirmação vai ficar mais clara mais tarde.

A maneira de proceder é a seguinte: através do uso de várias portas irá se obter (a partir de $\psi = a\,|0> + b\,|1> \in \mathbb{C}^2$) o estado

$$\frac{1}{2}\left[\ \{\ |00>\ \otimes\ (a\,|0> + b\,|1>)\} + \{\ |01>\ \otimes\ (a\,|1> + b\,|0>)\} + \right.$$

$$\left.\{\ |10>\ \otimes\ (a\,|0> - b\,|1>)\ \} + \{\ |11>\ \otimes\ (a\,|1> - b\,|0>)\ \}\ \right]. \tag{2.10}$$

em $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$.

Explicaremos mais tarde como se vai proceder após obter tal estado.

Inicialmente, escolhemos um Φ particular, mais exatamente

$$\Phi = \psi \otimes\ |0> \otimes\,|0> =\ a\,(\,|0> \otimes\,|0> \otimes\,|0>\,) + b\,(\,|1> \otimes\,|0> \otimes\,|0>\,),$$

ou de forma sintética

$$\Phi =\ |\,\psi\,0\,0> = a\,|000> + b\,|100>\ .$$

Assim dado o input ψ que se deseja teleportar para Alice então para comecar o procedimento alguém no laboratório de Bob produz o estado $\Phi = |\,\psi\,0\,0>$.

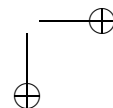
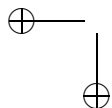
Alice deseja saber quem é ψ.

Alice tem conhecimento da seguinte sequência de chaves agindo em Φ. Isto é feito no laboratório para preparar o estado em uma certa posição desejada.

Primeiro usamos a chave Hadamard H_B só na posição B em $|\Phi>$. Assim,

$$H_B(|\Phi>) = |\Phi_1> = \frac{a\,|000> + a\,|010> + b|100> + b|110>}{\sqrt{2}}.$$

Depois, operamos com CNOT só na posição B C:

$$|\Phi_2> =\ \text{CNOT}_{BC}\,(|\Phi_1>) = \frac{a\,|000> + a\,|011> + b|100> + b|111>}{\sqrt{2}},$$

e ao resultado operamos com CNOT só na posição A B:

$$|\Phi_3> = \text{CNOT}_{AB}\,(|\Phi_2>) = \frac{a\,|000> + a\,|011> + b|110> + b|101>}{\sqrt{2}}.$$

Finalmente, aplicamos a chave Hadamard H_A só na posição A em $|\Phi_3>$,

$$|\Phi_4> = H_A(|\Phi_3>) =$$

$$\frac{1}{2}\,[\,\{\ |00>\ \otimes\ (a\,|0> + b\,|1>)\,\} + \{\ |01>\ \otimes\ (a\,|1> + b\,|0>)\,\} +$$

$$\{\ |10>\ \otimes\ (a\,|0> - b\,|1>)\ \} + \{\ |11>\ \otimes\ (a\,|1> - b\,|0>)\ \}\,].$$

Note que Φ_4 tem na posição C quatro possibilidades.

Esta sequencia de uso de chaves é um segredo que só Alice (e Bob) sabe.

O estado inicial Φ não era apropriado ao procedimento desejado mas, como veremos, Φ_4 sim.

Através de um aparelho o estado Φ_4 (que está num laboratório remoto) pode ser acessado por Bob mas apenas nas posições A e B (os dois primeiros no lattice). Já Alice tem acesso apenas ao que está na posição C.

Este acesso pode ser via uma cabo por exemplo; um que liga o laboratório à casa de Bob e outro cabo que liga o laboratório à casa de Alice. Este acessos não envolvem nenhuma medição.

Bob conhece a expressão de Φ_4 mas so tem acesso via as posições AB.

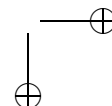
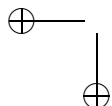
Então Bob faz uma medição do estado $\Phi_4 = |A\,B\,C>$ apenas no par de qbits A B (somente a esta parte que ele tem acesso). Suponha que por acaso a medição resultou em $|01>$, assim, pela expressão (2.10) acima, o estado Φ_4 colapsa e passa a ser

$$|01>\ \otimes\ (a\,|1> + b\,|0>).$$

Se alternativamente tivesse resultado em $|10>$ então, por (2.10) o estado colapsa e passa a ser $|10>\ \otimes\ (a\,|0> - b\,|1>)$.

Haveriam 4 alternativas de resultado da medição.

Para fixar o raciocínio suponha que a medição feita por Bob resultou em $|01>$. Neste caso, o estado colapsa e passa a ser

$$|01>\ \otimes\ (a\,|1> + b\,|0>).$$

Alice tem acesso (parcial) a este estado colapsado de 3 qbits pela comunicação com o laboratório, mas apenas na posição C. Ou seja, Alice recebe o estado colapsado $a\,|1> + b\,|0>$ em seu laboratorio C

Como Alice sabe da forma de Φ_4 (via a expressão (2.10)) - mas não da expressão explícita de ψ - tudo que Bob precisa fazer é dar um telefonema a Alice e dizer que sua medição na posição A B do lattice resultou em $|01>$. Então, Alice recebe na posição C do estado colapsado o estado $a\,|1> + b\,|0>$. Ninguem mais tem acesso a esta informação mesmo sabendo do telefonema de Bob.

Alice sabe da sequencia de portas utilizadas a partir do inicial ψ para resultar em $|\Phi_4>$. Assim, a partir do estado colapsado recebido $a\,|1> + b\,|0>$ e com a informação que Bob obteve a medição $|01>$ na posição AB, ela consegue identificar que $\psi = a\,|0> + b\,|1>$.

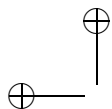
Se alternativamente, a medição de Bob tivesse resultado em $|10>$, então Alice recebe esta informação via um telefonema de Bob, e, a partir do estado colapsado $(a\,|0> - b\,|1>)$ na posição C, ela consegue identificar o estado $\psi = a\,|0> + b\,|1>$.

Os outros casos de possíveis resultados da medição de Bob são tratados de forma similar.

Se alguem de alguma forma interceptar o que foi dito no telefonema de Bob a Alice, mas não tem conhecimento de que o processo é baseado em $\psi = a\,|0> + b\,|1>$ e no estado Φ_4, terá uma informação inutil.

Desta forma o input ψ é passado a Alice via o procedimento acima. Em resumo: o que Bob faz é medir as duas primeiras posições de Φ_4 e avisar o que resultou a Alice.

O estado $\psi = a\,|0> + b\,|1>$ é uma potencialidade. Observe que a transmissão do estado $\psi = a\,|0> + b\,|1>$ significa identificar $|a|$. Desta forma Bob deverá repetir muitas vezes o procedimento acima de tal forma que muitas medições de Alice - ao final de cada uma - vão permitir estimar de forma estatística o valor de $|a|^2$.

Resultados gerais recentes sobre canais quânticos podem ser encontrados em [36], [49] and [50].

2.8 Formalismo Termodinâmico e Mecânica Estatística

A Mecânica Estatística Quântica generaliza o setting da Mecânica Estatística (ver [46], [128], [67] and [106] para descrições bastante detalhadas). Com o objetivo de auxiliar o entendimento do nosso texto pelo leitor vamos apresentar nesta seção uma breve descrição do ponto de vista matemático desta ultima teoria em seu caso mais simples: o lattice unidimensional.

O modelo para a Mecânica Estatística (no lattice unidimensional) proposto por Ruelle [210] é o seguinte: considere um reticulado unidimensional $\mathbb{Z}$. Cada inteiro está associado a um estado $1, \ldots, n$ e uma configuração do sistema é uma sequência $\omega_i \in \{1, \ldots, n\}$, $i \in \mathbb{Z}$. O nosso espaço de configurações é, então, $\Omega = \{1, \ldots, n\}^{\mathbb{Z}}$. Este espaço é chamado de Bernoulli.

Dado $w \in \Omega$ se usa a notação

$$w = (.., w_{-2}, w_{-1} \,|\, w_0, w_1, w_2, ..).$$

O $|$ serve para indicar onde está o site 0 no lattice $\mathbb{Z}$.

É usual considerar a **métrica** em Ω tal que para

$$x = (.., x_{-2}, x_{-1} | x_0, x_1, x_2, ..)$$

e

$$y = (.., y_{-2}, y_{-1} | y_0, y_1, y_2, ..)$$

temos que $d(x, y) = 2^{-n}$, onde n é tal que é o indice j de menor módulo onde as componentes x_j e y_j são distintas.

Se $n = 2$, um elemento em Ω poderia ser, por exemplo,

$$(..., 1, 2, 2, 1, 2 \,|\, 1, 1, 1, 2, 1, ...).$$

Por exemplo, se

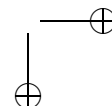
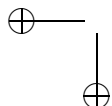
$$x = (..., 1, 2, 2, 1, 2 \,|\, 1, 1, 1, 2, 1, ...)$$

e

$$y = (..., 1, 2, 2, 1, 2 \,|\, 1, 1, 2, 2, 1, ...),$$

então $d(x, y) = 2^{-3}$.

Ainda, se

$$x = (..., 1, 2, 2, 2, 2 \,|\, 1, 1, 1, 2, 1, ...)$$

e

$$y = (..., 1, 2, 2, 1, 2 \,|\, 1, 1, 1, 2, 2, ...),$$

então $d(x, y) = 2^{-2}$.

Esta métrica torna Ω compacto.

Por $\sigma : \Omega \to \Omega$ se vai denotar a aplicação shift.

Por definição

$$\sigma((..., \omega_{-2}, \omega_{-1} \,|\, \omega_0, \omega_1, \omega_2, \dots)) = (..., \omega_{-2}, \omega_{-1}, \omega_0 \,|\, \omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots).$$

O shift σ é uma função continua em Ω.

Seja $\mathcal{T}$ o espaço de probabilidades invariantes para o shift, i.e., $\mu \in \mathcal{T} \Leftrightarrow \mu(A) = \mu(\sigma^{-1}(A))$, A conjunto de Borel. Este é o modelo da Mecânica Estatística no reticulado $\mathbb{Z}$ via o shift de Bernoulli. Um modelo mais apropriado seria sobre o reticulado tridimensional $\mathbb{Z}^3$, mas aqui vamos evitar situações mais complexas.

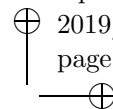
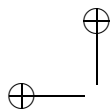
Seja $U : \Omega \to \mathbb{R}$ uma função contínua, que contém a informação relacionada com alguma grandeza física (energia, temperatura, campo magnético, etc.). Queremos obter agora uma maneira de determinar a distribuição de Gibbs no reticulado unidimensional infinito de uma forma semelhante a usada no caso finito e que foi descrita no começo da seção 1.10.

A **distribuição de Gibbs** associado a U será uma probabilidade ν sobre o espaço $\Omega = \{1, \dots, n\}^{\mathbb{Z}}$.

Por exemplo, considere uma determinada distribuição de spins + ou − de partículas no reticulado unidimensional $\mathbb{Z}$ (poderíamos ter escrito 0 e 1 no lugar de + e −, por exemplo). Devemos considerar o espaço de Bernoulli de dois símbolos $\Omega = \{+, -\}^{\mathbb{Z}}$, e probabilidades μ em Ω. fixado U, qual probabilidade ν é a de Gibbs asociada a U? É apropriado considerar apenas probabilidades em $\mathcal{T}$ porque não há uma razão natural para destacar um determinado ponto do reticulado como sendo o valor $i = 0$. Assim, a probabilidade de Gibbs deve ser invariante por translação.

Denota-se por $\overline{\,|\,++} = \{\omega = (\dots, \omega_{-1} \,|\, \omega_0, \omega_1, \omega_2, \omega_3, ...) |$ tal que $\omega_0 = +, \omega_1 = +\}$. Da mesma forma,

$$\overline{+ \,|\, -+} = \{\omega = (\dots, \omega_{-1} \,|\, \omega_0, \omega_1, \omega_2, \omega_3, ...) |$$

tal que $\omega_{-1} = +, \omega_0 = -, \omega_1 = +\}$, e assim por diante...

Em princípio se estaria interessado em obter a probabilidade de se ter no lattice $\mathbb{Z}$ um spin $+$ na posição -1, um spin $-$ na posição 0 e um spin $+$ na posição 1. Isto seria a probabilidade do cilindro $\overline{+|-+}$.

Por razões técnicas vamos nos concentrar em analisar o lattice $\Omega = \{+,-\}^{\mathbb{N}}$ e não $\Omega = \{+,-\}^{\mathbb{Z}}$. Sob certas hipótese naturais questões que envolvem o último podem ser traduzidas em questões que envolvem o primeiro (detalhes em [289] seção 1).

Assim, $\overline{++} = \{\omega = (\omega_1, \omega_2, \omega_3, \omega_4, ...)|$ tal que $\omega_1 = +, \omega_2 = +\}$.

O estado de Gibbs ν vai dizer, por exemplo, qual a probabilidade de ocorrer no lattice $\mathbb{N}$ o arranjo $\omega_1 = +, \omega_2 = -, \omega_3 = +$, através de $\nu(\overline{+-+})$.

Referimos o leitor para [26] e [233] onde são analisadas questões que envolvem a existencia de estados de Gibbs para lattices de spins de natureza mais geral.

Exemplo 2.8. Seja $\Omega = \{+,-\}^{\mathbb{N}}$. Vamos definir uma classe de funções U tal que é constante em cada um dos cilindros $\overline{++}$, $\overline{+-}$, $\overline{-+}$ e $\overline{--}$. Vamos identificar $+$ com 2 e $-$ com 1. Sejam $p_{11} \geq 0$, $p_{12} \geq 0$, $p_{21} \geq 0$, $p_{22} \geq 0$, $p_{11} + p_{12} = 1$, $p_{21} + p_{22} = 1$ e defina U da seguinte maneira:

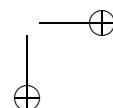
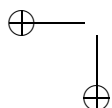
$$U(\omega) = \begin{cases} -\log p_{22}, & \text{se } \omega \in \overline{++} \\ -\log p_{21}, & \text{se } \omega \in \overline{+-} \\ -\log p_{12}, & \text{se } \omega \in \overline{-+} \\ -\log p_{11}, & \text{se } \omega \in \overline{--} \end{cases}$$

Neste caso, assumimos que no reticulado $\mathbb{Z}$ existe uma probabilidade p_{22} de obter um $+$ à direita de um $+$ e uma probabilidade p_{21} de obter um $-$ à direita de um $+$.

Ainda, o modelo descreve um sistema onde existe uma probabilidade p_{12} de obter um $-$ à direita de um $+$ e uma probabilidade p_{11} de obter um $-$ à direita de um $-$.

Uma pergunta natural é que probabildade sobre Ω tal sistema irá determinar em equilíbrio seguindo as Leis da Mecânica Estatística.

Qual seria o estado de Gibbs ν associado a tal U? Vamos descrever aqui uma versão simplificada do que é apresentado em [315] e [214].

Voltemos agora ao caso geral.

Dada uma função U contínua em Ω, vamos analisar o seguinte problema variacional. Seja

$$P(U) = \sup_{\mu \in \mathcal{T}} \left\{ S(\mu) + \int U d\mu \right\},$$

onde $S(\mu)$ é a entropia da probabilidade μ (ver definição a seguir). Diremos que $P(U)$ é a (ou, energia livre) **pressão topológica** associada a U.

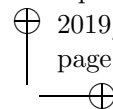
Gostaríamos de encontrar um probabilidade ν, definida em todo o espaço Ω, que assuma o supremo mencionado acima. Tal probabilidade será chamada de **estado de equilíbrio**, ou **estado de Gibbs** (ou, distribuição de Gibbs) associado ao potencial U. Em outras palavras,

$$P(U) = S(\nu) + \int U d\nu \geq S(\mu) + \int U d\mu, \text{ para todo } \mu \in \mathcal{T}.$$

O estado de equilíbrio ν será definido, portanto, por meio de um princípio de máximo, ou seja, ν maximiza $S(\mu) + \int U d\mu$. O potencial U do exemplo particular acima mencionado descreve uma certa interação entre spins no reticulado, mas o problema faz sentido para U qualquer, não necessariamente como no exemplo. Poderia, por exemplo, depender de mais coordenadas, não apenas duas. Vamos considerar na próxima seção o caso simples em que $U(\omega)$ depende apenas de duas, ou seja de ω_0 e ω_1, onde $\omega = (\cdots \omega_{-1} \omega_0 \omega_1 \cdots)$, ou seja, cada spin depende apenas do vizinho à direita. No exemplo dado abaixo, a solução pode ser obtida através de Álgebra Linear, ou seja, pela teoria de Cadeias de Markov e pelo Teorema de de Perron-Frobenius (descrito no Apêndice deste capítulo). Se o U depende de infinitas coordenadas, aí o procedimento via Álgebra Linear não resolve o problema; é necessário utilizar [289].

Ruelle mostrou que o que os físicos denominam de estado de Gibbs, no caso do reticulado $\mathbb{Z}$, pode ser obtido via o procedimento acima através de uma escolha correta de U. Diferentes problemas de Mecânica Estatística requerem diferentes U.

Se existir mais de uma probabilidade atingindo o máximo acima dizemos que existe transição de fase [172] [231] [125] .

A análise de questões mais gerais em Mecânica Estatística pode ser encontrada em [106] [128].

Vamos agora descrever a apropriada caracterização variacional do problema acima.

Para simplificar, no lugar de $\Omega = \{1, \cdots, n\}^{\mathbb{Z}}$, vamos considerar o lattice $\mathbb{N}$ e assim o espaço de Bernoulli

$$\Omega = \{1, \cdots, n\}^{\mathbb{N}}.$$

O problema para um U geral definido em $\Omega = \{1, \cdots, n\}^{\mathbb{Z}}$ pode ser reduzido a este $\{1, \cdots, n\}^{\mathbb{N}}$ (ver Proposition 1.2 [289]).

Seja uma função potencial do tipo $U : \{1, \cdots, n\}^{\mathbb{N}} \to \mathbb{R}$, com $U(\omega) = U(\omega_1, \omega_2)$, onde $\omega = (\omega_1 \omega_2 \omega_3 \cdots)$, isto é, U só depende de duas coordenadas. Vamos considerar aqui apenas potenciais U deste tipo. Este potencial vai descrever uma certa interação entre sites vizinhos no lattice $\mathbb{N}$. A pergunta que desejamos responder é: qual será a medida de equilíbrio associada a tal interação? Precisaremos de vários resultados preliminares antes da formalização completa desta questão.

Um cilindro de Ω de comprimento k é um conjunto A da seguinte forma: fixe $(a_1, \cdots, a_k) \in \{1, \cdots, n\}^k$.

$$A = \{\omega = (\omega_1, \cdots, \omega_k, \omega_{k+1}, .., \omega_n, ...) \in \Omega : (\omega_1, \cdots, \omega_k) = (a_1, \cdots, a_k)\}$$

Iremos denotar tal cilindro por

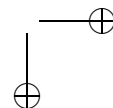
$$A = \overline{a_1 \cdots a_k}$$

Seja $\mathcal{F}$ a σ-álgebra gerada pelos cilindros de Ω de todos os comprimentos possíveis [122] [230]. Em geral se define uma probabilidade nos cilindros e se considera a sua extensão a conjuntos mais complexos na sigma algebra gerada via o teorema de Kolomogorov [122][230].

Por exemplo, fixados dois números positivos p_1 e p_2 que descrevem a probabildade p_1 de sair cara (ídentificada com 1) e p_2 de sair coroa (identificada com 2), definimos

$$\mu(\overline{a_1 \cdots a_k}) = p_1^{\#1 \text{ na sequencia } a_1 \cdots a_k} \; p_2^{\#2 \text{ na sequencia } a_1 \cdots a_k}.$$

Estamos descrevendo desta forma a moeda desonesta com probabilidade p_1, p_2, que é lançada de maneira independente.

Sendo assim, $\mu(\overline{11212}) = p_i^3 p_2^2$ nos diz a probabilidade de sair a sequência cara, cara, coroa, cara, coroa em cinco lançamentos. A moeda honesta corresponde ao caso em que $p_1 = 1/2 = p_2$.

Seja $\sigma : \Omega \to \Omega$ a aplicação shift dada por $(\sigma\omega)_k = \omega_{k+1}$, $k \in \mathbb{N}$. Em outras palavras, se $\omega = (\omega_1, \omega_2, \omega_3, ...)$,

$$\sigma(\omega) = (\omega_2, \omega_3, \omega_4, ...).$$

Por exemplo, em $\Omega = \{1, 2, 3\}^{\mathbb{N}}$, temos que

$$\sigma(1, 2, 1, 1, 3, 2, ..) = (2, 1, 1, 3, 2, ..).$$

Iremos a seguir considerar medidas μ sobre a σ-álgebra $\mathcal{F}$.

Definição 2.23. Diremos que a probabilidade μ é invariante para o shift σ se $\mu(\sigma^{-1}(A)) = \mu(A)$, $A \in \mathcal{F}$.

Vamos denotar por $\mathcal{T}$ é o conjunto das medidas invariantes [230]. Sabe-se que $\mathcal{T}$ é sequencialmente compacto se consideramos a convergência fraca de medidas [300] [230].

Por exemplo, no caso da moeda desonesta associada a p_1, p_2, temos que a μ que descrevemos acima é invariante. Por exemplo, note que

$$\sigma^{-1}(\overline{11212}) = \overline{111212} \cup \overline{211212}.$$

Ora,

$$\mu(\overline{11212}) = p_i^3\, p_2^2 = (p_1 + p_2) p_i^3\, p_2^2 = p_i^4\, p_2^2 + p_i^3\, p_2^3 =$$
$$\mu(\overline{111212} \cup \overline{211212}) = \mu(\sigma^{-1}(\overline{11212})).$$

Uma probabilidade invariante descreve uma invariancia por translação no lattice unidimensional. Sob outro ponto de vista ela descreve o conceito de probabilidade estacionária (ver [200] e [288]). A Mecânica Estatística de equilíbrio considera apenas as medidas estacionárias (ver [131] e [139]).

Seja k fixo e A_k o conjunto dos cilindros de comprimento k, $k \geq 1$, que é uma partição de Ω para cada k fixo.

Por exemplo, se $n = 2$ e $k = 3$,

$$A_3 = \{\overline{111}, \overline{112}, \overline{121}, \overline{122}, \overline{211}, \overline{212}, \overline{221}, \overline{222}\}.$$

Defina a **entropia da partição** por

$$S_\mu(A_k) = -\sum_{a \in A_k} \mu(a) \log \mu(a) \geq 0$$

onde escrevemos $a = \overline{a_1 a_2, \dots a_k} \in A_k$.

Por exemplo, se $n = 2$ temos

$$S_\mu(A_3) = - \sum_{a_j \in \{1,2\}, j=1,2,3} \mu(\overline{a_1, a_2, a_3}) \log \mu(\overline{a_1, a_2, a_3}).$$

Definimos a **entropia da medida** (com relação ao shift) por

$$s(\mu) = \lim_{k \to +\infty} \frac{S_\mu(A_k)}{k} \ , \ \ \mu \in \mathcal{T}, \tag{2.11}$$

A entropia é um conceito definido apenas para probabilidades invariantes. Este limite existe neste caso (ver [288]).

Pode se mostrar que, no caso da medida μ que foi obtida para a moeda desonesta, a correspondente entropia tem o valor $-p_1 \log p_1 - p_2 \log p_2$.

De fato, note que

$$-S_\mu(A_k) = \sum_{j=0}^{k} \binom{k}{j} p_1^{k-j} p_2^j \log(p_1^{k-j}\, p_2^j) =$$

$$\log p_1 \sum_{j=0}^{k} (k-j) \binom{k}{j} p_1^{k-j} p_2^j + \log p_2 \sum_{j=0}^{k} j \binom{k}{j} p_1^{k-j} p_2^j.$$

Como

$$(k-j) \binom{k}{j} = k \binom{k-1}{j} ,$$

para todo $0 \leq j \leq k-1$, então

$$\sum_{j=0}^{k} (k-j) \binom{k}{j} p_1^{k-j} p_2^j =$$

$$k\, p_1 \sum_{j=0}^{k} \binom{k-1}{j} p_1^{k-j} p_2^j = p_1\, k (p_i + p_2)^{k-1} = k\, p_1.$$

Trocando j por $k-j$ obtemos que

$$k\, p_2 = \sum_{j=0}^{k} j \binom{k}{j} p_1^{k-j} p_2^j.$$

Logo,

$$S_\mu(A_k) = -k\, p_1 \,\log p_1 - k\, p_2 \,\log p.$$

Desta forma segue a afirmação.

Dado a função potencial $U : \Omega \to \mathbb{R}$, onde $U(x_1, x_2, x_3, ...x_k, ..)$ diremos que ela depende das duas primeiras coordenadas se vale que $U(x_1, x_2, x_3, ...x_k, ..) = U(x_1, x_2)$ para quaisquer $(x_1, x_2, x_3, ...x_k, ..) \in \Omega$. Só vamos considerar U deste tipo aqui. O caso de U mais geral é tratada em [289].

Dado $a = (a_1, a_2, a_3, ...a_k, ..)$ note que $U(\sigma^{j-1}(a)) = U(a_j, a_{j+1})$.

Diremos que $U(i, j)$, $1 \leq i, j \leq n$ é a energia de interação entre ω_k e ω_{k+1} se $\omega_k = i$, $\omega_{k+1} = j$. Defina a **energia média** da partição A_k como sendo

$$E_\mu(A_k) = \sum_{a \in A_k} \left(\mu(a) \sum_{j=1}^{k-1} U(a_j, a_{j+1}) \right)$$

onde $a = \overline{a_1, a_2, .., a_k}$.

Neste caso a interação é apenas entre vizinhos no lattice. Em Mecânica Estatística se deseja saber qual probabilidade que resulta no lattice a partir de um interação dada por U.

A **energia específica** da partição com respeito a U é

$$e_U(\mu) = \lim_{k \to +\infty} \frac{E(A_k)}{k} \tag{2.12}$$

que é uma função contínua e afim. Afirmamos que

$$e_U(\mu) = \int U d\mu$$

De fato, pelo teorema ergódico de Birkhoff (proposição 2.34) e aplicando o teorema da convergência dominada para a sequência de funções $\frac{1}{N} \sum_{k=1}^{N-1} U \circ \sigma^k$, temos:

$$\int U d\mu = \int \lim_{N \to +\infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N-1} U(\sigma^{j-1}(\omega)) d\mu(\omega) = \lim_{N \to +\infty} \int \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N-1} U(\sigma^{j-1}(\omega)) d\mu(\omega) =$$

$$\lim_{N \to +\infty} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N-1} \int U(\sigma^{j-1}(\omega)) d\mu(\omega) =$$

$$\lim_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \sum_j \sum_{a\in A_N} \mu(a) U(\sigma^{j-1}(a)) =$$

$$\lim_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \sum_{a\in A_N} \mu(a) \sum_j U(a_j, a_{j+1}) = e_U(\mu).$$

Assim, se a **energia livre** em A_N para a probabilidade μ é

$$F_\mu(A_N) = S_\mu(A_N) - E_\mu(A_N),$$

definimos a **energia livre específica** como sendo o limite em N

$$f_U(\mu) = s(\mu) - e_U(\mu) = s(\mu) - \int U d\mu. \tag{2.13}$$

Vamos estar interessados na medida μ que maximiza tal valor. Esta medida será denominada de medida de Gibbs do potencial $-U$.

Definição 2.24. Uma matriz M da forma n por n com entradas não negativas é dita (linha) estocástica se a soma de cada linha é igual a 1.

Se todas as entradas de M são estritamente positivas então existe apenas um vetor $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_n)$ (todos os $\varphi_j > 0$) tal que $\varphi P = \varphi$ (multiplicação à esquerda) e ainda tal que $\sum_{j=1}^n \varphi_j = 1$ (ver [200] ou [230]).

O conjunto $\mathcal{M} \subset \mathcal{T}$ das medidas de Markov será definido da seguinte maneira. Diremos que $\mu \in \mathcal{M} \Leftrightarrow \exists$ matriz $n \times n$ linha **estocástica** tal que

$$\mu(\overline{a_1, \cdots a_N}) = \varphi_{a_1} M(a_1, a_2) M(a_2, a_3) \cdots M(a_{N-1}, a_N),$$

$a_1, \ldots, a_N \in \{1, \ldots, n\}$, onde φ é o único vetor de probabilidade invariante à esquerda para M (ou seja, $\varphi_k > 0$, $1 \leq k \leq n$, $\sum \varphi_i = 1$ e $\varphi M = \varphi$). Definindo μ sobre os cilindros, fica determinada de maneira única, pelo teorema de Kolmogorov, uma medida de probabilidade sobre a σ-álgebra gerada pelos cilindros.

No caso $n = 2$ estamos dizendo acima que vale o seguinte produto de matrizes

$$(\varphi_1 \quad \varphi_2) \begin{pmatrix} M(1,1) & M(1,2) \\ M(2,1) & M(2,2) \end{pmatrix} = (\varphi_1 \quad \varphi_2).$$

Observamos que a moeda desonesta é um caso particular de probabilidade Markoviana.

Suponha que a matriz M seja dada na forma

$$\begin{pmatrix} M(1,1) & M(1,2) \\ M(2,1) & M(2,2) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/3 & 2/3 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Neste caso, o φ normalizado que satisfaz a equação acima é $\varphi = (3/7, 4/7)$.

Desta forma

$$\mu(\overline{12212}) = \varphi_1 M(1,2) M(2,2) M(2,1) M(1,2) = \frac{1}{21}.$$

A maneira certa de pensar é que $M(i,j)$ nos dá a probabildade de se obter um j na posição a direita de i no lattice.

Usando o fato que $\varphi M = \varphi$ se pode mostrar que tal μ Markoviana é invariante pelo shift. Se M tem todas entradas positivas então o vetor de probabildade φ que resolve $\varphi M = \varphi$ é único [314] [200]. Pode se mostrar [288] [230] que a entropia associada é dada por

$$h(\mu) = -\sum_{i,j=1}^{n} \varphi_i \; M(i,j) \; \log M(i,j).$$

Voltando à função potencial U dada acima, seja a matriz $Q = Q_U$ definida por

$$Q(i,j) = e^{-U(i,j)} \;, \;\; 1 \leq i,j \leq n \tag{2.14}$$

Um potencial $U : \Omega \to \mathbb{R}$ que depende das duas primeiras cordenadas, isto é, para $x = (x_0, x_1, x_2, x_3, ...)$, $U(x)$ é constante nos cilindros de tamanho dois $\overline{i,j}$, $i,j = 1,2,..,n$, pode ser identificado com uma matriz $U = U(i,j)$ do tipo n por n. O leitor pode perceber agora a analogia do que consideramos neste momento com o descrito na seção anterior (quando falamos de uma interação no lattice de spins quânticos para um Hamiltoniano que depende de duas coordenadas).

A matriz Q não é necessariamente Markoviana mas tem todas as entradas positivas. Podemos então utilizar o Teorema de Perron-Frobenius (ver Proposição 2.32).

Seja assim, $\lambda = \lambda(U)$ o maior autovalor (positivo) de Q e sejam l, r os autovetores à esquerda e à direita de Q correspondentes a λ, e normalizados de modo que $l_i > 0$, $r_i > 0$, $1 \leq i \leq n$ e $\langle l, r \rangle = \sum_i l_i r_i = 1$.

Defina a seguinte matriz:

$$M(i,j) = \frac{1}{\lambda} Q(i,j) \frac{r_j}{r_i} \ , \ \ 1 \leq i, j \leq n \tag{2.15}$$

A matriz $M = M(U)$ é positiva e é linha estocástica. De fato:

$$Qr = \lambda r \Rightarrow Q \begin{pmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_n \end{pmatrix} = \lambda(r_1, \cdots, r_n) \Rightarrow \sum_j Q(i,j) r_j = \lambda r_i$$

Então

$$\sum_j M(i,j) = \sum_j \frac{1}{\lambda} Q(i,j) \frac{r_j}{r_i} = \frac{1}{\lambda r_i} \sum_j Q(i,j) r_j = \frac{1}{\lambda r_i} \lambda r_i = 1.$$

Assim, associamos ao potencial U, via $Q(i,j) = e^{-U(i,j)}$, $1 \leq i, j \leq n$ uma matriz estocástica M.

Observe que M possui um vetor de probabilidade invariante $\varphi = (\varphi_1, \varphi_2, .., \varphi_n)$

$$\varphi_i = l_i r_i, \ \ 1 \leq i \leq n, \tag{2.16}$$

De fato,

$$\varphi M = (l_1 r_1, \cdots, l_n r_n) M \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (\varphi M)_i = \sum_k l_k r_k M(k,i) = \sum_k l_k r_k \frac{1}{\lambda} Q(k,i) \frac{r_i}{r_k} =$$

$$= \frac{r_i}{\lambda} \sum_k l_k Q(k,i) = \frac{r_i}{\lambda} \lambda l_i = r_i l_i = \varphi_i \Rightarrow \varphi M = \varphi$$

Note que l_i e r_i são definidos a menos de constante multiplicativa e acima escolhemos $\varphi = (\varphi_1, \cdots, \varphi_n)$ como sendo $\varphi_i = l_i r_i$, $i = 1, \ldots, n$ e $\sum \varphi_i = 1$, $\varphi_i > 0$.

Desta forma, a partir de U obtivemos Q e φ que podem definir uma medida Markoviana ν. Esta probabilidade ν será a solução que buscamos para o problema de maximização da pressão. Note também que associamos a U um autovalor λ (via a matriz Q).

Vamos formular a caracterização da maximização da pressão e mostrar que resulta na ν. Para U fixo, seja $\nu = \nu^{(U)}$ a medida de Markov definida pela matriz de transição $M = M(U)$ obtida acima, isto é,

$$\nu(a) = \varphi_{a_1} M(a_1, a_2) M(a_2, a_3) \cdots M(a_{k-1}, a_k) \ , \ a \in A_k.$$

Observação 2.1. Note que se pode escrever a expressão acima como

$$\nu(a) = e^{\log \varphi_{a_1} + \log M(a_1,a_2) + \log M(a_2,a_3) + \ldots + \log M(a_{k-1},a_k)} \ , \ a \in A_k.$$

Os $\log M(a_1, a_2)$ descrevem (na escala log), via a matriz $M(i, j)$, as probabilidades de elementos vizinhos no lattice. A soma $\log M(a_1, a_2) + \log M(a_2, a_3) + \ldots + \log M(a_{k-1}, a_k)$ descreve a probabilidades do sistema composto (olhando do site 1 até o site k). Na Mecânica Estatística não existe interferencia das probabilidades entre vizinhos no site. Na Mecânica Quântica as interferências de carater ondulatório não podem ser negligenciadas, e, assim o produto tensorial aparece como ferramenta fundamental para descrever tal fenômeno.

Dizemos que σ é **ergódica** para μ (invariante) se $\sigma^{-1}(A) = A$ implica $\mu(A) = 0$ ou 1. Pode-se mostrar que a probabilidade ν acima é invariante e ergódica para o shift σ (ver seção 11.6 [289], ou [230]).

Afirmamos que $\sup_{\mu \in \mathcal{T}} f_U(\mu) = f_U(\nu)$. Mais precisamente, temos o seguinte:

Teorema 2.31. *Seja $U : \Omega \to \mathbb{R}$ contínua. Então:*

$$f_U(\mu) \leq \log \lambda(U) = \log(\lambda) \ , \ \forall \mu \in \mathcal{T} \tag{2.17}$$

e vale a igualdade se e somente se μ for a medida de Markov $\nu = \nu^{(U)}$ definida acima.

Em outras palavras

$$P(U) = \sup_{\mu \in \mathcal{T}} \left\{ S(\mu) + \int U d\mu \right\} = S(\nu) + \int U d\nu.$$

Assim, ν é a **medida de Gibbs** *associado ao potencial $-U$.*

Demonstração. Não vamos mostrar a unicidade da maximizante.

Na demonstração a seguir, escreveremos $\nu^{(U)} = \nu$.

Seja ν a medida de Markov definida por M, e $\mu \in \mathcal{T}$ qualquer.

Sejam M e φ definidos anteriormente. Assumimos que para qualquer cilindro a vale

$$\nu(a) = \varphi_{a_1} M(a_1, a_2) M(a_2, a_3) \cdots M(a_{k-1}, a_k).$$

Ou seja, ν é a medida de Markov associada a M e φ.

Considere uma μ invariante qualquer para o shift σ.

Desejamos estimar

$$f_U(\mu) = s(\mu) - e_U(\mu) = s(\mu) - \int U d\mu \tag{2.18}$$

Primeiro vamos analisar o termo $\int U d\mu$.

Para N fixo, considere os cilindros de comprimento N. Então

$$E_\mu(A_N) = \sum_{a \in A_N} \left(\mu(a) \sum_{k=1}^{N-1} U(a_k, a_{k+1}) \right)$$

Como

$$M(i,j) = \frac{1}{\lambda} Q(i,j) \frac{r_j}{r_i} = \frac{1}{\lambda} e^{-U(i,j)} \frac{r_j}{r_i} \ , \ \ 1 \leq i, j \leq n,$$

então

$$Q(i,j) = \lambda\, M(i,j) \frac{r_i}{r_j} \ , \ \ 1 \leq i, j \leq n.$$

Escrevendo $\lambda(U) = \lambda$ e $a = \overline{a_1, \cdots a_N}$ temos:

$$\sum_{k=1}^{N-1} U(a_k, a_{k+1}) = \sum_{k=1}^{N-1} -\log Q(a_k, a_{k+1}) = -\log \prod_{k=1}^{N-1} Q(a_k, a_{k+1}) =$$

$$= -\log \left(\prod_{k=1}^{N-1} M(a_k, a_{k+1}) \lambda \frac{r_{a_k}}{r_{a_{k+1}}} \right) =$$

$$= -\left(\log \prod_{k=1}^{N-1} M(a_k, a_{k+1}) + \log \prod_{k=1}^{N-1} \lambda + \log \prod_{k=1}^{N-1} r_{a_k} - \log \prod_{k=1}^{N-1} r_{a_{k+1}} \right) =$$

$$= -(N-1) \log \lambda - \log \left(\prod_{k=1}^{N-1} M(a_k, a_{k+1}) \right) - \log r_{a_1} + \log r_{a_N} =$$

$$= -(N-1)\log\lambda - \log\frac{\nu(a)}{\varphi_{a_1}} - \log r_{a_1} + \log r_{a_N}$$

$$= -(N-1)\log\lambda - \log\nu(a) + \log l_{a_1} r_{a_1} - \log r_{a_1} + \log r_{a_N}$$

$$= -(N-1)\log\lambda - \log\nu(a) + \log l_{a_1} + \log r_{a_N}.$$

Lembre que $\sum_{a\in A_N}\mu(a) = 1$.

Calculando a energia média com respeito a μ obtemos

$$E_\mu(A_N) = \sum_{a\in A_N}\mu(a)\sum_{k=1}^{N-1}U(a_k, a_{k+1}) =$$

$$= \sum_{a\in A_N}\mu(a)(-(N-1)\log\lambda - \log\nu(a) + \log l_{a_1} + \log r_{a_N})$$

$$= -\sum_{a\in A_N}\mu(a)\ \log(\nu(a) - (N-1)\log\lambda + \log l_{a_1} + \log r_{a_N}.$$

Como o número de $a_i \in \{1,2,..,n\}$ é finito e os r_{a_i} e l_{a_i} são positivos e limitados, então existe c_1 e c_2 tal que para todo i vale $c_1 < \log\, r_{a_i}, \log\, l_{a_i} < c_2$.

Sendo assim,

$$-\sum_{a\in A_N}\mu(a)\log\nu(a)\ -\ (N-1)\log\lambda\ +\ 2c_1 \le E_\mu(A_N) \le$$

$$-\sum_{a\in A_N}\mu(a)\log\nu(a)\ -\ (N-1)\log\lambda\ +\ 2c_2.$$

Assim,

$$-\sum_{a\in A_N}\mu(a)\log\mu(a) + \sum_{a\in A_N}\mu(a)\log\nu(a)\ +\ (N-1)\log\lambda\ -\ 2c_2 \le$$

$$S_\mu(A_N) - E_\mu(A_n) \le -\sum_{a\in A_N}\mu(a)\log\mu(a) + \sum_{a\in A_N}\mu(a)\log\nu(a)\ +\ (N-1)\log\lambda\ -\ 2c_1.$$

Observando que o somatório

$$\sum_{a\in A_N}\mu(a)\log\frac{\nu(a)}{\mu(a)} \tag{2.19}$$

é negativo (veja a proposição 2.33), temos

“quantum2
2019/12/13
page 296

$$\frac{1}{N}F_\mu(A_N) = \frac{1}{N}(S_\mu(A_N) - E_\mu(A_N)) \leq \tag{2.20}$$

$$\frac{1}{N}\sum_{a\in A_N}\mu(a)\log\frac{\nu(a)}{\mu(a)} + \log\lambda - \frac{\log\lambda}{N} - \frac{(\log l_{a_1} + \log r_{a_N})}{N} \leq \tag{2.21}$$

$$\leq \log\lambda - \frac{\log\lambda}{N} - 2\frac{c_1}{N} \tag{2.22}$$

Fazendo $N \to +\infty$, obtemos a desigualdade procurada, isto é, $f_U(\mu) \leq \log\lambda$. Para mostrar a igualdade, observe que o somatório (2.19) é igual a zero se $\mu = \nu$. Segue daí que

$$\log\lambda - \frac{\log\lambda}{N} - 2\frac{c_2}{N} \leq \frac{1}{N}F_\nu(A_N) \leq \log\lambda - \frac{\log\lambda}{N} - 2\frac{c_1}{N} \tag{2.23}$$

Fazendo $N \to +\infty$, obtemos a igualdade, ou seja, $f_U(\mu) = \log\lambda$ se $\mu = \nu^{(U)}$ (isto é, se $\mu = \nu$ for a medida de Markov associada a U). Isso prova o teorema.

□

Apêndice

Vamos apresentar abaixo uma descrição mais precisa de alguns resultados que forma utilizados acima.

Proposição 2.32. (Perron-Frobenius) *[314] Seja $A = \| a_{ij} \|$ uma matriz com entradas estritamente positivas, $1 \leq i, j \leq n$. Então existem $\lambda > 0$ e vetores $u = (u_1, \cdots, u_n)$ e $v = (v_1, \cdots, v_n)$ tais que*

1. $u_i > 0, v_i > 0 \ , \ 1 \leq i \leq n$

2. $\displaystyle\sum_{j=1}^{n} a_{ij}u_j = \lambda u_i \ , \ 1 \leq i \leq n$ *e* $\displaystyle\sum_{i=1}^{n} v_i a_{ij} = \lambda v_j \ , \ 1 \leq j \leq n$

(i.e., u é autovetor à direita de A e v é autovetor à esquerda de A).

Demonstração. Seja A matriz com entradas positivas. Mostremos que existe pelo menos um vetor u com coordenadas positivas, e $\lambda \geq 0$, tais que

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} u_j = \lambda u_i \ , \ \ 1 \leq i \leq n.$$

Considere o conjunto convexo $\mathcal{H}$ de vetores $h = (h_1, \cdots, h_n)$ tais que $h_i \geq 0$, $1 \leq i \leq n$ e $\sum_{i=1}^{n} h_i = 1$. A matriz A determina uma transformação contínua $A : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, dada por $Ah = h'$, onde

$$h'_i = \frac{\sum_{j=1}^{n} a_{ij} h_j}{\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} h_j}$$

O teorema do ponto fixo de Brouwer [223] nos diz que tal aplicação possui pelo menos um ponto fixo. Se u é tal ponto fixo então $Au = u$, ou seja,

$$u_i = \frac{\sum_{j=1}^{n} a_{ij} u_j}{\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} u_j}$$

Fazendo $\lambda = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} u_j$, obtemos o que queríamos.

Considere a matriz $A^t = \parallel a^t_{ij} \parallel$, $a^t_{ij} = a_{ji}$. Pela primeira parte do lema, podemos obter λ^* e v tais que $A^t v = \lambda^* v$, ou seja,

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ji} v_j = \lambda^* v_i$$

e $v_i > 0$.

Note que $\langle u, v \rangle$ é um número positivo.

Além disso,

$$\lambda \langle u, v \rangle = \langle Au, v \rangle = \langle u, A^t v \rangle = \lambda^* \langle u, v \rangle$$

o que implica $\lambda = \lambda^*$.

$\square$

Proposição 2.33. *Se $p_1, \cdots, p_k$ e $q_1, \cdots, q_k$ são distribuições de probabilidade, com $p_i > 0$, $i = 1, \cdots, k$, então*

$$\sum_{i=1}^{k} q_i \log \frac{q_i}{p_i} \geq 0$$

com igualdade valendo se e somente se $p_i = q_i$, $i = 1 \cdots, k$ (por convenção, escrevemos $0 \log 0 = 0$).

Demonstração. a desigualdade é evidente no caso em que $p_i = q_i$ porque $\log 1 = 0$. No caso geral, observe que a função $\varphi(x) = -x \log x$ é estritamente côncava, pois $\varphi''(x) < 0$. Como

$$\varphi(\sum_{i=1}^{k} p_i \frac{q_i}{p_i}) = \varphi(\sum_{i=1}^{k} q_i) = \varphi(1) = 0,$$

então

$$0 = \varphi(\sum_{i=1}^{k} p_i \frac{q_i}{p_i}) = \varphi(\sum_{i=1}^{k} q_i) \geq \sum_{i=1}^{k} p_i \varphi(\frac{q_i}{p_i}) = \sum_{i=1}^{k} p_i \frac{-q_i}{p_i} \log \frac{q_i}{p_i}$$

Assim, $\sum_{i=1}^{k} q_i \log \frac{q_i}{p_i} \geq 0$.

Ainda, se $\sum_{i=1}^{k} q_i \log \frac{q_i}{p_i} = 0$, então pelo que precede

$$\varphi(\sum_{i=1}^{k} p_i \frac{q_i}{p_i}) = \sum_{i=1}^{k} p_i \varphi(\frac{q_i}{p_i}).$$

Como $\varphi'' < 0$, decorre daí que os $\frac{q_i}{p_i}$ são todos iguais. A partir de $1 = \sum_{i=1}^{k} q_i = \sum_{i=1}^{k} p_i$, concluímos que $p_i = q_i$, para $i = 1, 2, .., k$
$\square$

Diremos que uma propriedade vale em **quase toda parte** (q.t.p.), ou com **probabilidade 1**, se o conjunto dos elementos onde não vale a propriedade tem medida nula.

Lembre que denotamos o conjunto das medidas invariantes por $\mathcal{T}$, e ainda, que dizemos que $\mu \in \mathcal{T}$ é *ergódica* se toda vez que $A \in \mathcal{F}$ é tal que $T^{-1}(A) = A$, então é porque $\mu(A) = 0$ ou $\mu(A) = 1$.

Em outras palavras μ é ergódica se todo conjunto invariante é trivial (tem medida zero ou 1).

Proposição 2.34. (Teorema Ergódico de Birkhoff) *[288] Seja T uma transformação que preserva medida em $(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$. Seja f função mensurável e integrável. Então existe K, $\mu(K) = 1$ tal que para todo $\omega \in K$,*

$$\lim_{n \to +\infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f(T^{k-1}\omega) = \hat{f}(\omega)$$

(i.e., o limite existe q.t.p.), onde $\hat{f}$ é T-invariante e vale que

$$\int \hat{f} d\mu = \int f d\mu$$

Se T é ergódica para μ então $\hat{f} = \int f d\mu$ q.t.p.

Note que no caso do shift no espaço de Bernoulli, ou seja $T = \sigma$, o conjunto K é um conjunto na sigma algebra gerada pelos cilindros. No entanto, para decidir se um elemento $w \in \{1, 2, ..., n\}^{\mathbb{N}}$ está ou não no K acima, não basta ter o conhecimento de apenas um número finito das coordenadas de w.

Uma versão do Torema Ergódico no setting quântico é devida a J. Von Neumann (ver [342]).

Um espaço vetorial X com uma topologia $\mathcal{T}$ é um **espaço vetorial topológico** se a soma é uma função contínua de $X \times X$ em X e se a multiplicação por escalar é uma função contínua de $\mathbb{R} \times X$ em X. Um espaço vetorial topológico é dito **localmente convexo** se podemos obter uma base para a topologia formada por conjuntos convexos.

Proposição 2.35. (Krein-Milman) *Seja K um conjunto convexo compacto em um espaço vetorial topológico localmente convexo. Então a intersecção de todos os conjuntos convexos fechados contendo os pontos extremos de K é o próprio K.*

Em [113] e [114] são apresentados resultados que relacionam medidas de Gibbs do Formalismo Termodinâmico com estados KMS.

2.9 A Integral de Caminho de Feynman

Neste capítulo derivamos uma conveniente representação para o núcleo integral do operador de evolução de Schrödinger, $e^{-itH/\hbar}$. Esta representação, denominada a "Integral de Feynman", vem a ser uma ferramenta heurística, mas eficiente, para investigar a conexão entre a Mecânica Quântica e Clássica. Referencias gerais mais detalhadas do assunto podem ser encontradas em [156], [143] [186], [98], [138], [6], [279], [247], [350], [354] , [19] e [310]. As referencias [79] e [3] se propõem a dar uma versão abrangente e rigorosa do assunto.

A integral de Feynman descrita aqui explora o ponto de vista Lagrangiano (existe também o ponto de vista Hamiltoniano).

Fixado o período de tempo $[0,T]$ então os caminhos diferenciáveis $\phi : [0,T] \to \mathbb{R}^n$ que são criticos para a integral da ação Lagrangeana

$$S(\phi) = \int_0^T L(\phi(t), \phi'(t))\, dt$$

são determinados pela equação de Euler-Lagrange (ver [228] e [229]). Estes determinam as trajetórias do sistema mecânico sob a ação do potencial V quando tomamos o Lagrangeano

$$L(x,v) \;=\; \frac{m}{2}\,|v|^2 - V(x).$$

Este é o princípio de mínima ação.

Primeiramente vamos introduzir a Fórmula Produto de Trotter.

Seja A, B, e $A+B$ operadores auto-adjuntos em um espaço de Hilbert $\mathcal{H}$. Se $[A,B] \neq 0$, então em geral $e^{i(A+B)} \neq e^{iA}e^{iB}$. Mas vale o seguinte resultado.

Teorema 2.36. *Fórmula Produto de Trotter*

Sejam A e B limitados, ou A, B, e $A+B$ auto-adjuntos. Então, para $Re(\lambda) \leq 0$,

$$e^{\lambda(A+B)} = \overset{s}{\lim_{n\to\infty}} \left[e^{\lambda\frac{A}{n}} e^{\lambda\frac{B}{n}} \right]^n. \tag{2.24}$$

◇

Observação 2.2.

O sobrescrito s na equação 2.24 indica *convergência na topologia forte de operadores*. Para operadores A_n e A num espaço de Hilbert $\mathcal{H}$, tais que $D(A_n) = D(A)$, $A_n \to A$ na topologia forte de operador (e escrevemos $\lim^s_{n\to\infty} A_n = A$) se, e só se, $\|A_n - A\| \to 0$ (na norma de operadores e restrito ao domínio $D(A)$.)

$\diamond$

Prova para A e B limitados:

Podemos assumir que $\lambda = 1$. Defina então $S_n = e^{(A+B)/n}$ e $T_n = e^{A/n}e^{B/n}$.

Denote $R := e^{(\|A\|+\|B\|)}$.

Agora, por uma espécie de soma telescópica podemos escrever a diferença $S_n^n - T_n^n$ como segue abaixo

$$\begin{aligned} S_n^n - T_n^n &= S_n^n - T_n S_n^{n-1} + T_n S_n^{n-1} - T_n^2 S_n^{n-2} + T_n^2 S_n^{n-2} + \cdots - T_n^n = \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} T_n^k (S_n - T_n) S_n^{n-k-1}. \end{aligned}$$

Deste modo,

$$\begin{aligned} \|S_n^n - T_n^n\| &= \left\| \sum_{k=0}^{n-1} T_n^k (S_n - T_n) S_n^{n-k-1} \right\| \leq^1 \sum_{k=0}^{n-1} \|T_n\|^k \|(S_n - T_n)\| \|S_n\|^{n-k-1} \leq^2 \\ &\leq \sum_{k=0}^{n-1} R^{k/n} R^{(n-k-1)/n} \|(S_n - T_n)\| = \sum_{k=0}^{n-1} R^{(n-1)/n} \|(S_n - T_n)\| =^3 \\ &= nR^{(n-1)/n} \|(S_n - T_n)\| \leq^4 ne^{\|A\|+\|B\|} \|(S_n - T_n)\|, \end{aligned}$$

onde 1 segue da desigualdade triangular e do fato que $\|A^n\| \leq \|A\|^n$ para todo operador linear limitado; a desigualdade 2 segue do fato que definimos $R := e^{(\|A\|+\|B\|)}$; 3 é válida pois a soma é feita sobre k (e não n!); para analisar a passagem 4 note que,

$$R^{(n-1)/n} = e^{\frac{(n-1)}{n}[\|A\|+\|B\|]} \leq e^{\|A\|+\|B\|}.$$

Justificamos, deste modo, a passagem 4.

Note que

$$S_n = e^{(A+B)/n} = I + (A+B)/n + \frac{1}{2}(A+B)^2/(n^2) + ...,$$

e

$$T_n = e^{A/n}e^{B/n} = I + (A+B)/n + \frac{1}{2}(A^2 + B^2 + 2AB)/(n^2) + ...$$

Assim,

$$S_n - T_n = \frac{1}{2\,n^2}\,(BA - AB) + ...$$

Usando a expansão em série de potências do operador exponencial, vemos que $\|S_n - T_n\| = O(1/n^2)$ a assim que $\|S_n^n - T_n^n\| \to 0$ quando $n \to \infty$.

$\square$

Considere uma partícula em $\mathbb{R}^d$ descrita por um operador auto-adjunto de Schrödinger

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + \mathcal{V}. \tag{2.25}$$

Lembre que a dinâmica de uma tal partícula é dada pela equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \mathbf{H}\psi. \tag{2.26}$$

Relembre também que a solução para esta equação, com a condição inicial

$$\psi|_{t=0} = \psi_0, \tag{2.27}$$

é dada em termos do operador de evolução $U(t) := e^{-i\mathbf{H}\,t/\hbar}$ quando

$$\psi = U(t)\psi_0. \tag{2.28}$$

Usaremos a seguinte notação: dado um operador integral A vamos denotar por $A(x,y)$ seu núcleo (ou, kernel) integral.

Assim se $\mathcal{K}$ é um operador integral, com núcleo $\mathcal{K}(x,y)$, ele leva funções $\psi(x)$ em funções $[\mathcal{K}(\psi)]\,(y) = \mathcal{K}(\psi)(y) = \int \mathcal{K}(x,y)\psi(x)dx = \phi(y)$. Ou seja $\mathcal{K}(\psi) = \phi$.

Desta forma, dado $\psi(x)$, temos que $\phi(y) = \mathcal{V}(\psi)\,(y) = V(y)\psi(y)$.

O operador $\mathcal{V}$ pode ser considerado integral via o núcleo degenerado $\mathcal{V}(x,y) = V(x)\,\delta_y(x)$. Da mesma forma, $e^{\mathcal{V}}(x,y) = e^{V(x)}\,\delta_y(x)$.

Nosso objetivo neste capítulo é entender o operador de evolução $U(t) = e^{-i\,\mathbf{H}\,t/\hbar}$ obtendo uma conveniente representação de seu núcleo integral. **Denotamos o núcleo integral de $U(t)$ por $U_t(x,y)$** (também chamado de **propagador de x a y**).

Fixados $t > 0$ e pontos x, y, considere a classe dos caminhos ϕ tais que $\phi(0) = x$ e $\phi(t) = y$. Desejamos descrever o núcleo integral $U_t(x, y)$ atraves da ação S de caminhos ϕ em tal classe, ou seja, através de expressões $S(\phi, t) = \int_0^t \left\{ \frac{m}{2} |\dot{\phi}(s)|^2 - V(\phi(s)) \right\} ds$.

Uma representação da exponencial da soma de operadores é fornecida pela *Fórmula Produto de Trotter* (comforme teorema 2.36). A fórmula produto de Trotter nos diz que

$$e^{-iHt/\hbar} = e^{i\left(\frac{\hbar^2 t}{2m}\Delta - \mathcal{V}t\right)/\hbar} = \overset{s}{\lim_{n\to\infty}} K_n^n, \tag{2.29}$$

onde

$$K_n = e^{\frac{i\hbar t}{2m\,n}\Delta} e^{-\frac{i\,\mathcal{V}\,t}{\hbar\,n}}. \tag{2.30}$$

Note que os operadores $-\mathcal{V}$ e $\triangle$ **não comutam**.

Seja o operador $K_n = e^{\frac{i\hbar t}{2m\,n}\Delta} e^{-\frac{i\,\mathcal{V}\,t}{\hbar\,n}}$ e $K_n(x, y)$ seu núcleo integral.

Denote por $e^{\frac{i\,\hbar t\Delta}{2m\,n}}(x, y)$ o kernel integral do operador $e^{\frac{i\,\hbar t\Delta}{2m\,n}}$.

Note que o núcleo integral de $A = e^{-\frac{i\,\mathcal{V}\,t}{\hbar\,n}} = \sum_n \frac{1}{n!} (-\frac{i\,\mathcal{V}\,t}{\hbar\,n})^n$ é $A(x, y)$ $= e^{-\frac{iV(x)t}{\hbar\,n}} \delta_y(x)$.

Vai seguir da próxima proposição que

$$K_n(x, y) = e^{\frac{i\,\hbar t\Delta}{2m\,n}}(x, y) e^{-\frac{iV(x)t}{\hbar\,n}}. \tag{2.31}$$

Note que

$$K_n(\psi(x)(y) = e^{\frac{i\,\hbar t\Delta}{2m\,n}} \left(e^{-\frac{i\,V\,t}{\hbar\,n}} (\psi(x)) \right) =$$

$$\int_{\mathbb{R}^d} \left(e^{\frac{i\,\hbar t\Delta}{2m\,n}}(x, y) e^{-\frac{iV(x)t}{\hbar\,n}} \right) \psi(x)\, dx.$$

Lembre que (Prop. 0.3) se $\mathcal{K}_1$ e $\mathcal{K}_2$ são operadores integrais (com núcleos K_1 e K_2 respectivamente), então o núcleo integral de $\mathcal{K} = \mathcal{K}_1 \mathcal{K}_2$ é

$$K(x, y) = \int_{\mathbb{R}^d} K_2(x, z) K_1(z, y) dz. \tag{2.32}$$

Suponha que $\mathcal{K}$ tenha núcleo integral K. Portanto, da proposição 0.3 somos levados a concluir (de modo iterativo) que o núcleo integral do operador $\mathcal{K}^n$ é

$$K^n(x,y) = \int \cdots \int K(x,x_1)K(x_1,x_2)\cdots K(x_{n-2},x_{n-1})K(x_{n-1},y)\,dx_1\cdots dx_{n-1}.$$

Concluímos dos resultados acima que

$$U_t(x,y) = \lim_{n\to\infty} \int \cdots \int K_n(x,x_1)\cdots K_n(x_{n-2},x_{n-1})K_n(x_{n-1},y)dx_1\cdots dx_{n-1}. \tag{2.33}$$

Determinando $U_t(x,y)$ estaremos determinando a ação de $e^{-iHt/\hbar}$ em estados ψ.

No que segue aparecem integrais impróprias que não convergem. Mas elas convergem no sentido de distribuições. Em geral, $U_t(x,y)$ vai ser um núcleo no sentido de distribuições.

Vimos anteriormente (seção 1.5) que para toda função de onda ψ bem comportada vale

$$(e^{\frac{i\hbar^2 t\Delta}{2m}}\psi)(y) = \left(\frac{2\pi i\hbar\, t}{m}\right)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{\frac{im|x-y|^2}{2\hbar t}}\psi(y)dy. \tag{2.34}$$

Logo, substituindo (2.31) e (2.34) em (2.33) temos, definindo $x_0 = x$ e $x_n = y$ que (já que (2.34) vale para $\forall\,\psi$)

$$\begin{aligned}
U_t(x,y) \quad &= \quad U_t(x_0,x_n) = \lim_{n\to\infty}\int\cdots\int \left(\frac{2\pi i\hbar\, t}{m\, n}\right)^{-d/2} e^{\frac{i\,m\,n\,|x_n-x_{n-1}|^2}{2\hbar t}}dx_{n-1}e^{-i\frac{V(x_{n-1})t}{\hbar\, n}} \times \\
&\times \quad \left(\frac{2\pi i\hbar\, t}{m\, n}\right)^{-d/2} e^{\frac{i\,m\,n|x_{n-1}-x_{n-2}|^2}{2\hbar t}}dx_{n-2}e^{-i\frac{V(x_{n-2})t}{\hbar\, n}} \times\cdots\times \\
&\times \quad \left(\frac{2\pi i\hbar\, t}{m\, n}\right)^{-d/2} e^{\frac{i\,m\,n\,|x_1-x_0|^2}{2\hbar t}}dx_1 e^{-i\frac{V(x_0)t}{\hbar\, n}} = \\
&= \quad \lim_{n\to\infty}\int\cdots\int dx_1\cdots dx_{n-1}\left(\frac{2\pi i\hbar\, t}{m\, n}\right)^{-nd/2} \times \\
&\times \quad \exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{k=0}^{n-1}\left(m\,n\frac{|x_{k+1}-x_k|^2}{2t} - V(x_k)\frac{t}{n}\right)\right) = \\
&= \quad \lim_{n\to\infty}\int\cdots\int e^{\frac{i}{\hbar}S_n}\left(\frac{2\pi i\hbar\, t}{m\, n}\right)^{-nd/2}dx_1\cdots dx_{n-1},
\end{aligned}$$

onde

$$S_n := \sum_{k=0}^{n-1}\left(m\,n\frac{|x_{k+1}-x_k|^2}{2t} - V(x_k)\frac{t}{n}\right). \tag{2.35}$$

Resumidamente,

$$U_t(x,y) = \lim_{n\to\infty} \int \cdots \int e^{\frac{i}{\hbar}S_n} \left(\frac{2\pi i\hbar\, t}{m\, n}\right)^{-nd/2} dx_1 \cdots dx_{n-1}, \qquad (2.36)$$

com S_n dado por (2.35) e $x = x_0$ e $y = x_n$.

Defina a função linear por partes ϕ_n tal que $\phi_n(0) = x = x_0$, $\phi_n(t/n) = x_1, \cdots, \phi_n(t) = y = x_n$. Obtemos assim um caminho linear por partes ligando o ponto inicial x ao ponto final y. Fica assim determinado pelo processo de discretização temporal caminhos poligonais que em algum sentido vão capturar a essencia do fenômeno físico no limite $n \to \infty$.

Então,

$$S_n = \sum_{k=0}^{n-1} \left\{ m \frac{|\phi_n((k+1)t/n) - \phi_n(kt/n)|^2}{2(t/n)^2} - V(\phi_n(k\,t/n)) \right\} t/n. \qquad (2.37)$$

Note que S_n é uma soma de Riemann para a ação clássica

$$S(\phi_n, t) = \int_0^t \left\{ \frac{m}{2} |\dot{\phi}_n(s)|^2 - V(\phi_n(s)) \right\} ds \qquad (2.38)$$

do caminho ϕ_n. Assim, fazendo $n \to \infty$, temos que (2.37) converge a ação do caminho clássico ϕ entre o tempo 0 e t:

$$S(\phi, t) = \int_0^t \left\{ \frac{m}{2} |\dot{\phi}(s)|^2 - V(\phi(s)) \right\} ds.$$

A expressão $\frac{m}{2}|\dot{\phi}(s)|^2 - V(\phi(s))$ descreve o Lagrangiano do caminho $\phi(t)$ de uma partícula sob a ação de um potencial V.

Assim, no procedimento descrito acima dado ϕ e n associamos a ele seu caminho poligonal ϕ_n. A seguir fazemos o limite em n da soma de Riemann até a integral que envolve ϕ.

Uma descrição heurística do procedimento acima se faz necessário neste momento. Existem muitos caminhos diferenciáveis ϕ ligando em tempo t o ponto x ao ponto y. Fixado o Hamiltoniano e $t > 0$ desejamos associar uma certa medida tomando valores complexos para "tubos"de possíveis caminhos ϕ. Esta medida teria uma espécie de densidade de tal forma que para cada ϕ se associaria o número $e^{\frac{iS(\phi,t)}{\hbar}}$, onde $S(\phi, t) = \int_0^t \left\{ \frac{m}{2}|\dot{\phi}(s)|^2 - V(\phi(s)) \right\} ds$. Assim, alguns caminhos vão ter um peso

relativo maior dependendo de $S(\phi, t)$ que os outros. Note que $e^{\frac{iS(\phi,t)}{\hbar}}$ não é um número real mas contribuirá via interferencia de forma semelhante ao que mencionamos na seção 1.1. O ponto fundamental é que o **kernel** do operador integral U_t pode ser expresso (via uma aproximação em que se discretiza o tempo) quando $n \to \infty$ por integrais sobre caminhos poligonais.

Deste modo, mostramos que

$$U_t(x,y) = \lim_{n\to\infty} \int_{P^n_{x,y,t}} e^{iS_n/\hbar} D\phi_n, \tag{2.39}$$

onde $P^n_{x,y,t}$ é o espaço $(n-1)$-dimensional dos caminhos ϕ_n com $\phi_n(0) = x$ e $\phi_n(t) = y$, e que são lineares nos intervalos $(kt/n, (k+1)t/n)$ para $k = 0, 1, \ldots, n-1$, e

$$D\phi_n = \left(\frac{2\pi\, i\hbar\, t}{n\, m}\right)^{-nd/2} d\phi_n(t/n)\cdots d\phi_n((n-1)t/n). \tag{2.40}$$

Heuristicamente, quando $n \to \infty$, então, ϕ_n aproxima-se de um caminho ϕ, ligando o ponto inicial x ao ponto terminal y (no tempo t), e $S_n \to S(\phi)$. Daí, podemos escrever ”formalmente”

$$U_t(x,y) = \int_{P_{x,y,t}} e^{i\, S(\phi,t)/\hbar} D\phi. \tag{2.41}$$

Onde, fixados x, y, t, temos que $P_{x,y,t}$ é um espaço de caminhos de x a y, definido como

$$P_{x,y,t} := \{\phi : [0,t] \to \mathbb{R}^d : \int_0^t |\dot\phi|^2 < \infty,\ \ \phi(0) = x,\ \ \phi(t) = y\}. \tag{2.42}$$

A equação (2.41) é a *Integral de Caminho de Feynman.* **A expressão formal envolvendo $D\phi$ não é, de fato, uma integral,** na acepção de Teoria da Medida (conforme [122]), mas uma **expressão formal** cujo sentido está dado via um limite por 2.39.

Em [104] o autor apresenta uma descrição explicita da integral de caminho no caso do pêndulo.

Para x, y, t fixos o valor da expressão 2.41, quando $\hbar \to 0$, é similar a análise do método da fase estacionária (ver [94]). Este tópico será

analisado nas próximas seções e vai desvendar uma interessante relação (no limite semiclássico) com o princípio de mínima ação.

Observe que se desejássemos calcular para t fixo o traço do operador integral U_t seria natural calcular $\int U_t(x,x)dx$ e assim a integral de caminhos acima deveria tomar em conta apenas caminhos fechados em $P_{x,x,t}$

O análogo desta forma integral quântica descrita acima (2.41) em Processos Estocásticos é o que se chama de Brownian bridge (ver [190]). Neste caso não é uma expressão formal e a correspondente medida (real) está bem definida.

Observamos que não existe do ponto de vista da Física **uma trajetória que varia continuamente** e que descreve o caminho seguido pela partícula quântica. No entanto, o formalismo matemático acima descrito (fazendo de conta que tal acontece) fornece ferramentas que são usadas com sucesso em vários problemas que envolvem aplicações importantes da Mecânica Quântica (ver [149], [307], [98], [310], [247]).

Note que se $V = 0$ então $e^{-i\,t\mathbf{H}/\hbar} = K_n^n$. Logo a sequencia (2.29) deve ser constante.

2.10 Sobre a amplitude de Feynman

O formalismo de integrais de caminhos, sobre o qual as amplitudes de Feynman estão baseadas, descreve algumas situações interessantes e esclarecedoras. Desejamos compara o setting Quântico com o setting Clássico, em particular com o princípio de mínima ação (ver [9], [2], ou [228]).

Considere o seguinte experimento: temos um emissor de fótons (à direita), um detector (à esquerda), e abaixo um espelho (figura 2.1). Supondo que temos uma barreira (ao centro) entre o emissor e o detector (assim a luz emitida não pode ir diretamente para o detector) concluímos, após uma análise clássica, que todo fóton que atingiu o detector foi refletido pelo espelho, e além disso, deve ter sido no seu centro, pois o ângulo de incidência é igual ao ângulo de reflexão, e tanto o emissor como o detector estão a uma mesma distância da barreira. Isso é o que observamos quando fazemos experimentos com um feixe de luz. Entretanto, quando temos apenas uma partícula, o formalismo das integrais nos mostra um outro aspecto do fenômeno: devemos considerar todas as trajetórias "possíveis"para a luz. Em outras palavras, não de-

vemos supor que a luz anda apenas em linha reta, e muito menos que ela sabe qual o caminho mais curto! Mas para fins de simplificação do problema, iremos supor que a luz percorre apenas linhas retas e a situação que iremos considerar é: um fóton, incidindo e refletindo em qualquer ângulo e em qualquer ponto do espelho.

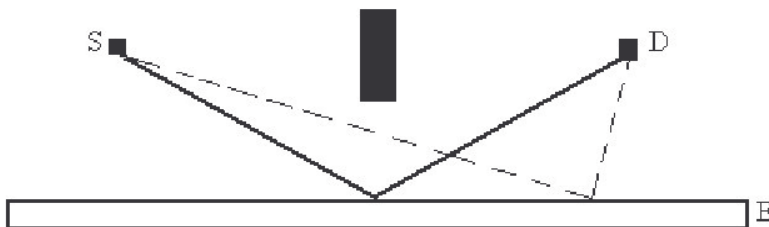



Figura 2.1: Dois caminhos para o fóton. Sabe-se que o caminho em que o fóton atinge o espelho no centro nos fornece o menor tempo, mas não é correto dizer que os outros pontos são proibidos, ou que nunca irão ocorrer. Teoricamente, é possível que um fóton atinja outro ponto do espelho (embora a probabilidade seja pequena, e, em grande escala, descobrimos que as amplitudes de probabilidade destas alternativas se cancelam).

Observamos que o foton não tem uma massa intrínseca detectável e se desloca na velocidade da luz; de qualquer forma o raciocínio heurístico que descrevemos a seguir é esclarecedor.

A princípio pode parecer estranho supor que um fóton atinge uma parte qualquer do espelho. Isso nos leva a uma pergunta: como poderia o fóton saber qual é o caminho mais curto e por que ele escolheria tal caminho? A figura 2.2 nos fornece um gráfico que indica os tempos necessários para um fóton sair da fonte e chegar até o detector.

No presente caso $V = 0$ e $S(\phi,t) = \int_0^t \left\{ \frac{m}{2} |\dot{\phi(s)}|^2 \right\} ds$. Para cada possível caminho ϕ a "densidade complexa"da probabilidade local associada a este ponto é da ordem de $e^{i\frac{1}{\hbar} S(\phi,t)}$. Para calcular a probabilidade de um feixe de caminhos devemos integrar $e^{i\frac{1}{\hbar} S(\phi,t)}$ nos possíveis caminhos ϕ. Na verdade, esta "integração"é um limite de somas de Riemann.

Nosso objetivo é mostrar que existe maior probabilidade da partícula quântica bater na região central do espelho. Ainda, a medida que $\hbar$ fica pequeno, então esta probabilidade fica cada vez de maior intensidade (quando comparada com as outras possiveis regiões onde ela bate). Isto pode ser interpretado como uma justificativa do Princípio de Mínima

ação clássico (via o limite semi-clássico). Note que como não existe um potencial V no problema em consideração, podemos manter, alternativamente, $\hbar$ fixo e considerar que massa vai a infinito e a mesma propriedade vai ocorrer.

É natural assumir neste modelo simplificado que a velocidade $\|\dot{\phi(s)}\| = c$, $\forall s$, é constante. Se $\gamma(\phi)$ é o comprimento do caminho ϕ então $t\,c = \gamma(\phi)$, onde t é o tempo que o caminho leva de D a S.

Vamos assumir que numa certa região determinada por um feixe de caminhos, a soma

$$|\sum_{j=1}^{200} e^{i\frac{1}{\hbar}\,S(\phi_j,t_j)}|^2 = |\sum_{j=1}^{200} e^{i\frac{1}{\hbar}\,t_j\,\frac{m}{2}\,c^2}|^2 = |\sum_{j=1}^{200} e^{i\frac{1}{\hbar}\,\frac{m\,c}{2}\,\gamma(\phi_j)}\,|^2,$$

da uma boa aproximação das probabilidade (após normalização) envolvidas. Com isto queremos dizer que a probabilidade P_1 de ser atingida uma região central do espelho (por exemplo G na figura 2.2 contendo, digamos, dois pontos de batida) seria aproximadamente

$$\frac{|\sum_{k=100}^{101} e^{i\frac{1}{\hbar}\,\frac{m\,c}{2}\,\gamma(\phi_k)}\,|^2}{|\sum_{j=1}^{200} e^{i\frac{1}{\hbar}\,\frac{m\,c}{2}\,\gamma(\phi_j)}\,|^2},$$

Por outro lado, a probabilidade P_2 de ser atingida uma região localizada na ponta do espelho (por exemplo M na figura abaixo contendo, digamos dois pontos de batida) seria aproximadamente

$$\frac{|\sum_{k=199}^{200} e^{i\frac{1}{\hbar}\,\frac{m\,c}{2}\,\gamma(\phi_k)}\,|^2}{|\sum_{j=1}^{200} e^{i\frac{1}{\hbar}\,\frac{m\,c}{2}\,\gamma(\phi_j)}\,|^2}.$$

Note que o tamanho de M e G no espelho são os mesmos.

Observe que os valores dos comprimentos $\gamma(\phi_k)$, para k tal que $k = 100, 101$, são bem menores que os valores dos comprimentos $\gamma(\phi_k)$, para k tal $k = 199, 200$. Mas isto por si só não é suficiente para explicar o fenômeno a ser entendido.

O valor do quociente P_2/P_1 deve ser estimado por

$$\frac{|\sum_{k=100}^{101} e^{i\frac{1}{\hbar}\,\frac{m\,c}{2}\,\gamma(\phi_k)}\,|^2}{|\sum_{j=199}^{200} e^{i\frac{1}{\hbar}\,\frac{m\,c}{2}\,\gamma(\phi_j)}\,|^2},$$

Daremos uma explicação informal sobre o que acontece, devida a Feynman (mais detalhes podem ser vistos em seu livro de divulgação

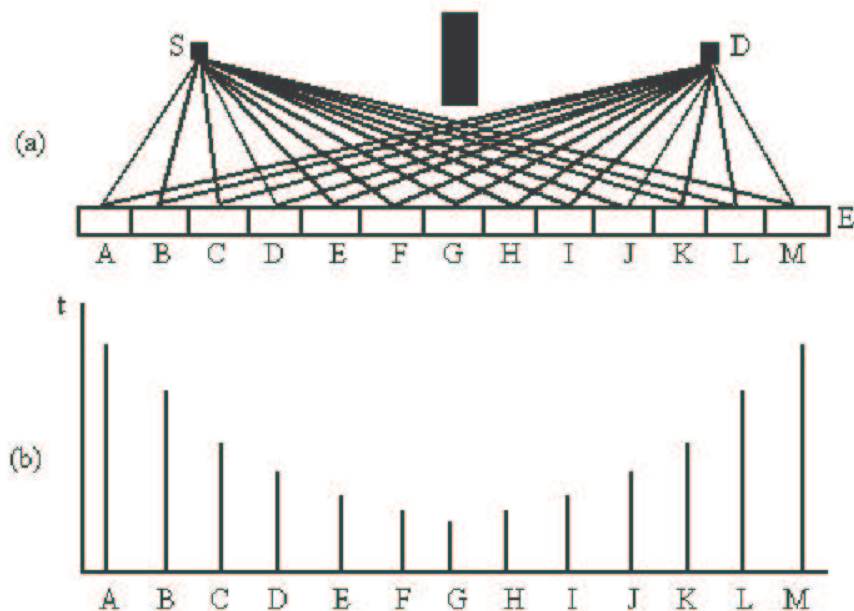



Figura 2.2: Vamos dividir o espelho em partições de mesmo tamanho. (a) Todos os caminhos possíveis. (b) Tempos associados aos caminhos. O importante aqui é notar que a diferença entre os tempos associados a dois pontos do centro, digamos F e G, é **menor** do que a diferença entre os tempos associados a dois pontos dos extremos, digamos A e B. É exatamente isso que determina o fato que no mundo clássico ($\hbar$ pequeno) apenas observamos a luz gerando ângulos de incidência e reflexão iguais.

QED: The strange theory of light and matter, Princeton University Press, 1985). A reflexão da luz é um fenômeno que envolve uma certa porção do espelho. Com isso em mente, observamos o seguinte fato: a diferença entre os tempos associados a pontos próximos do centro (região entre E e I) é menor do que a diferença entre os tempos associados a pontos dos extremos do espelho (perto de A ou M), veja a figura 3. Isso significa que a diferença de fase entre as exponenciais associadas à amplitude de Feynman (ver a expressão obtida nas integrais) é pequena para pontos próximos ao centro, e logo temos amplitudes de probabilidade que contribuem para uma amplitude maior e logo, uma probabilidade maior; nos extremos, a variação de fase é maior, e existe uma contribuição menor de amplitudes, o que confere a esses pontos uma menor

probabilidade. Vamos elaborar sobre isto.

De fato, suponha para simplificar que se tenha a diferença $\gamma(\phi_{101}) - \gamma(\phi_{100}) = 0.03$ e também a diferença $\gamma(\phi_{200}) - \gamma(\phi_{199}) = 0.3$.

Assim, obtemos

$$\frac{P_2}{P_1} = \left| \frac{1 + e^{i\,\frac{1}{\hbar}\,\frac{m\,c}{2}\,0.3}}{1 + e^{i\,\frac{1}{\hbar}\,\frac{m\,c}{2}\,0.03}} \right|,$$

que por razões elementares de trigonometria é bem pequeno. Note que $1 + e^{i\,\frac{1}{\hbar}\,\frac{m\,c}{2}\,0} = 2$, é o máximo valor possível de $1 + e^{i\,\frac{1}{\hbar}\,\frac{m\,c}{2}\,x}$ (para valores pequenos positivos de x).

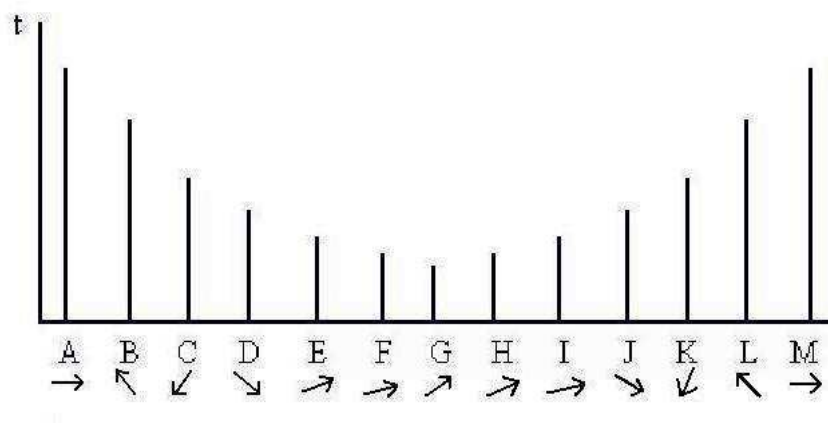



Figura 2.3: A cada caminho possível é associado uma seta de um certo tamanho fixado. A direção da seta varia a medida que o tempo muda. Nesse sentido, somar amplitudes está associado a somar setas. Assim vemos que a maior contribuição para a soma total ocorre entre E e I, onde as direções são quase as mesmas porque os tempos dos caminhos naquela região são quase os mesmos.

Logo, o centro é a região onde ocorrem pequenas variações de fase e onde é possível obter uma amplitude considerável. Observe na expressão acima que a medida que a massa m cresce (ou, $\hbar$ decresce) se amplifica a diferença entre P_1 e P_2. E é por isso que podemos dizer, aproximadamente, que a luz percorre a trajetória em que o tempo é mínimo (também, não é difícil provar que no caminho onde o tempo é mínimo, o ângulo de incidência é igual ao ângulo de reflexão).

Vamos agora calcular alguns exemplos concretos.

Exemplo 2.9.

Para entendermos o formalismo das integrais de caminho de Feynman, vamos começar pelo caso mais simples que é o caso de uma partícula livre em uma dimensão. Sendo assim, a função potencial é identicamente nula, i.e., $V(x) = 0$. Consideremos uma partição do intervalo $[0, t]$, digamos $\{0, t/n, 2t/n, \ldots, (n-1)t/n, t\}$, vamos também definir como anteriormente $x = x_0$ e $y = x_n$.

Neste caso, a ação 2.35 pode ser escrita como

$$S_n = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{m}{2} \frac{(x_{k+1} - x_k)^2}{(t/n)}.$$

Portanto, por 2.36 temos

$$\begin{aligned} U_t(x,y) &= \lim_{n\to\infty} \int \cdots \int e^{\frac{i}{\hbar} S_n} \left(\frac{2\pi i\hbar\, t}{m\, n}\right)^{-n/2} dx_1 \cdots dx_{n-1} = \\ &= \lim_{n\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2\pi i\hbar\, t}{m\, n}\right)^{-n/2} e^{\frac{i\, m\, n}{2\hbar\, t} \sum_{k=0}^{n-1} (x_{k+1} - x_k)^2} dx_1 \cdots dx_{n-1}. \end{aligned}$$

Façamos uma mudança na variável de integração como segue

$$y_k = \left(\frac{m\, n}{2\hbar\, t}\right)^{1/2} x_k.$$

Logo, o propagador tornar-se-à

$$U_t(x,y) = \lim_{n\to\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \cdots \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2\pi i\hbar\, t}{m\, n}\right)^{-\frac{n}{2}} \left(\frac{m\, n}{2\hbar\, t}\right)^{-\frac{(n-1)}{2}} e^{i \sum_{k=0}^{n-1} (y_{k+1} - y_k)^2} dy_1 \cdots dy_{n-1}.$$

Vamos analisar, para cada $k \in \{0, \ldots, n-1\}$, o resultado da integral anterior com o intento de encontrar resultados que nos esclareçam sobre o fenômeno físico subjacente.

Ora, para $n = 2$ temos

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 e^{i[(y_1 - y_0)^2 + (y_2 - y_1)^2]} = \int_{-\infty}^{\infty} dy_1 e^{i\left[2\left(y_1 - \frac{y_2 + y_0}{2}\right)^2 + \frac{1}{2}(y_2 - y_0)^2\right]} = \\ &= e^{\frac{i}{2}(y_2 - y_0)^2} \left(\frac{i\, \pi}{2}\right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Prosseguindo,

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dy_1 dy_2 e^{i[(y_1-y_0)^2+(y_2-y_1)^2+(y_3-y_2)^2]} = \\ &= \left(\frac{i\,\pi}{2}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty} dy_2 e^{\frac{i}{2}(y_2-y_0)^2+i(y_3-y_2)^2} = \\ &= \left(\frac{i\,\pi}{2}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty} dy_2 e^{\frac{3i}{2}\left(y_2-\frac{y_0+2y_3}{3}\right)^2+\frac{i}{3}(y_3-y_0)^2} = \\ &= \left(\frac{i\,\pi}{2}\right)^{1/2}\left(\frac{2i\,\pi}{3}\right)^{1/2} e^{\frac{i}{3}(y_3-y_0)^2} = \left(\frac{(i\,\pi)^2}{3}\right)^{1/2} e^{\frac{i}{3}(y_3-y_0)^2}. \end{aligned}$$

Pelos cálculos de I_1 e I_2 somos levados a deduzir que

$$I_{n-1} = \left(\frac{(i\pi)^{n-1}}{n}\right)^{1/2} e^{\frac{i}{n}(y_n-y_0)^2}.$$

Donde que, o propagador $U_t(x,y)$ vem a ser

$$\begin{aligned} U_t(x,y) &= \lim_{n\to\infty}\left(\frac{2\pi i\hbar\, t}{m\, n}\right)^{-\frac{n}{2}}\left(\frac{m\, n}{2\hbar\, t}\right)^{-\frac{(n-1)}{2}}\left(\frac{(i\pi)^{n-1}}{n}\right)^{1/2} e^{\frac{i}{n}(y_n-y_0)^2} = \\ &= \lim_{n\to\infty}\left(\frac{m}{2\hbar\, t}\right)^{1/2}(i\pi)^{-1/2} e^{\frac{i}{n}(y_n-y_0)^2} =^{1} \\ &= \left[\frac{m}{2i\,\pi\hbar\, t}\right]^{1/2} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(y-x)^2}, \end{aligned}$$

onde $y_n - y_0 = (\frac{m\,n}{2\,\hbar\, t})^{1/2}\, t$.

A igualdade 1 deve-se a mudança de variável de integração feita anteriormente, bem como ao fato que definimos $x_0 = x$ e $x_n = y$. Portanto, o propagador para o caso de uma partícula livre movendo-se em uma dimensão tornar-se-à, finalmente

$$U_t(x,y) = \left[\frac{m}{2i\,\pi\hbar\, t}\right]^{1/2} e^{-\frac{m}{2i\hbar t}(x-y)^2}.$$

Mais geralmente, quando tivermos o caso em que $\phi_n(t_0) = x = x_0$ e $\phi_n(t) = y = x_n$ a expressão anterior toma a forma

$$U_{t,t_0}(x,y) = \left[\frac{m}{2i\,\pi\hbar\,(t-t_0)}\right]^{1/2} e^{-\frac{m}{2i\hbar(t-t_0)}(x-y)^2}.$$

Além disso é interessante observar que a expressão de $U_t(x,y)$ pode ser identificada com uma distribuição gaussiana, cuja variância é proporcional a $\sqrt{t}$, sendo assim, se tomarmos o limite de $t \to t_0$, obteremos uma *Delta de Dirac* em torno da média x_0, i.e., $U_t(x,y) \to \delta(x-y)$, quando $t \to 0$.

Este fato está de acordo com a nossa intuição sobre o problema em consideração.

□

Exemplo 2.10.

O *Oscilador Harmônico Simples* (OHS) é um dos problemas clássicos de maior interesse estudados pela mecânica quântica. Neste exemplo vamos calcular a integral de Feynman deste sistema com o intento de obter o propagador $U_t(x,y)$ de um caminho conectando os pontos $x(0) = x$ e $x(t) = y$. É produtivo observar que, segundo nossa abordagem, o resultado será dado em termos de um produto infinito de aproximações parciais de *frações contínuas*.

A ação $S(x(t))$ de um particular caminho conectando os pontos $x(0) = x$ e $x(t) = y$ determina a amplitude de fase. Para calcular $U_t(x,y)$, devemos somar (integração) as amplitudes de todos os caminhos. Como vimos no texto $U_t(x,y)$ é dado por 2.41, onde

$$S(x(t),t) = \int_0^t L(x(s),\dot{x}(s),s)ds, \tag{2.43}$$

e $L(x(s),\dot{x}(s),s)$ é o *Lagrangiano* do sistema, que no caso de um OHS unidimensional é dado por

$$L(x,\dot{x}) = K - V = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{2.44}$$

Consideremos como no exemplo 2.9 uma partição do intervalo $[0,t]$ do tipo $\{0, t/n, 2t/n, \ldots, (n-1)t/n\}$. Então, a ação 2.43 pode ser expressa como o limite de uma soma de Riemann em termos das variáveis de integração $x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}$ como segue (aqui também estaremos supondo que $x(0) = x = x_0$ e $x(t) = y = x_n$)

$$S_n = \sum_{k=0}^{n-1} \left[\frac{1}{2}m \left(\frac{x_{k+1} - x_k}{(t/n)} \right)^2 (t/n) - V(x_k)(t/n) \right]. \tag{2.45}$$

Estamos agora na posição de substituir 2.45 em 2.36 para iniciar o processo de integração. Entretanto, façamos a seguinte mudança de variável

$$y(s) = x(s) - \chi(s), \tag{2.46}$$

onde $\chi(s)$ representa o caminho seguido pela partícula clássica (trajetória clássica) e $y(s)$ representa o afastamento entre os caminhos $x(s)$ e $\chi(s)$ (a variação).

A trajetória $\chi(s)$ de um OHS unidimensional clássico sujeito às condições de fronteira $\chi(0) = x$ e $\chi(t) = y$ (para cada t fixo) é dada pelo solução da equação diferencial de segunda ordem

$$\ddot{\chi} + \omega^2 \chi = 0, \tag{2.47}$$

ou seja

$$\chi(s) = \frac{y \sin(\omega s) + x \sin[\omega(t-s)]}{\sin(\omega t)}, \tag{2.48}$$

assim $y(0) = y(t) = 0$.

Todo este arrazoado foi feito porque é possível mostrar que para qualquer hamiltoniano quadrático em x e $\dot{x}$ a mudança de variáveis 2.46 nos permite separar o propagador em dois fatores, a saber

$$U_t(x,y) = e^{\frac{i}{\hbar} S_{Cl}} \int_0^0 e^{\frac{i}{\hbar} S(y(t))} D[y(t)]. \tag{2.49}$$

Vamos elaborar sobre isto. Mas antes note que o limite de integração acima **não** deve ser tomado literalmente (é apenas uma notação)! Escrevemos desta forma apenas para lembrar ao leitor que todos os caminhos $y(t)$ são nulos nos extremos.

Escrevendo um caminho qualquer $\phi \in P_{x,y,t}$ como uma variação do caminho clássico ϕ_{cl}, $\phi = \phi_{cl} + \phi_{var}$, onde $\phi_{var} \in P_{0,0,t}$, temos

$$S\left(\phi, t\right) = S\left(\phi_{cl} + \phi_{var}, t\right) = \int_0^t \frac{m}{2} |\dot{\phi}_{cl} + \dot{\phi}_{var}|^2 - \frac{m\omega^2}{2} |\phi_{cl} + \phi_{var}|^2 ds =$$

$$= S\left(\phi_{cl}, t\right) + S\left(\phi_{var}, t\right) + \int_0^t \left[m \left\langle \dot{\phi}_{cl}, \dot{\phi}_{var} \right\rangle - m\omega^2 \left\langle \phi_{cl}, \phi_{var} \right\rangle \right] ds =$$

$$= S\left(\phi_{cl}, t\right) + S\left(\phi_{var}, t\right) - \int_0^t m \left[\left\langle \ddot{\phi}_{cl}, \phi_{var} \right\rangle + \omega^2 \left\langle \phi_{cl}, \phi_{var} \right\rangle \right] ds +$$

$$+\underbrace{\left\langle \dot{\phi}_{cl}, \phi_{var} \right\rangle\Big|_0^t}_{=0}$$

$$\Rightarrow S(\phi, t) = S(\phi_{cl}, t) + S(\phi_{var}, t) \tag{2.50}$$

onde usamos que o caminho clássico satisfaz as equações de Euler-Lagrange $\ddot{\phi}_{cl} = -\omega^2 \phi_{cl}$.

Pode ser mostrado que a ação clássica é dada por

$$S(\phi_{cl}, t) = \frac{\omega}{2\sin(\omega t)}[(x^2 + y^2)\cos(\omega t) - 2xy]. \tag{2.51}$$

Toda dificuldade reside em calcular o segundo termo de 2.49. Agora, o termo integrando de 2.49 pode ser resolvido utilizando-se a expressão 2.36 e 2.45, no que consiste

$$u_0 = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{m\,n}{2\pi\, i\,\hbar t}\right)^{n/2}\int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im\,n}{2\hbar t}\sum_{k=0}^{n-1}\left[(y_{k+1}-y_k)^2-\omega^2\left(\frac{t}{n}\right)^2 y_k^2\right]}\times$$

$$\times dy_1 dy_2 \ldots dy_{n-1}, \tag{2.52}$$

onde $y_0 = y(0) = 0$ e $y_n = y(t) = 0$.

Procedendo de forma análoga ao que fizemos no exemplo 2.9 vamos analisar o resultado da integral iterada para cada valor de k. A integração sobre y_1 envolvem somente aqueles termos da soma que contém y_1 todos os outros são tratados como constantes e podem ser fatorados. Assim, a integral em y_1 assume a forma

$$I_1 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im\,n}{2\hbar t}\left[(y_2-y_1)^2+(y_1-y_0)^2-\omega^2\left(\frac{t}{n}\right)^2 y_1^2\right]} dy_1. \tag{2.53}$$

Tal integração é resolvida completando-se os quadrados no expoente (ou utilizando-se um recurso de computação algébrica, onde podemos citar o *Mathematica* que particularmente usamos.) obtemos

$$I_1 = c_1\left(\frac{m\,n}{2\pi\, i\hbar\, t}\right)^{-1/2} e^{\frac{im\,n}{2\hbar t}\left[(y_2^2+y_0^2)-\frac{1}{\gamma}(y_2+y_0)^2\right]}, \tag{2.54}$$

onde $c_1 = \sqrt{1/\gamma}$ e onde

$$\gamma := 2 - \frac{(\omega t)^2}{n^2} \tag{2.55}$$

A segunda integral (envolvendo y_2) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[\left(\frac{im\,n}{2\hbar t}\right)\left((y_3-y_2)^2+(y_2-y_1)^2+(y_1-y_1)^2\right)\right]\times \\ &\times \exp\left[\left(\frac{im\,n}{2\hbar t}\right)\left(-\omega^2\left(\frac{t}{n}\right)^2 y_1^2-\omega^2\left(\frac{t}{n}\right)^2 y_2^2-\omega^2\left(\frac{t}{n}\right)^2 y_3^2\right)\right]dy_1dy_2. \end{aligned}$$

Agora, levado em conta a equação 2.54 vem que a expressão anterior tornar-se-á

$$\begin{aligned} I_2 = c_1\left(\frac{m\,n}{2\pi\, i\,\hbar t}\right)^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im\,n}{2\hbar t}\left[(y_3-y_2)^2-\omega^2\left(\frac{t}{n}\right)^2 y_2^2\right]}\times \\ \times e^{\frac{im\,n}{2\hbar t}\left[(y_2^2+y_0^2)-\frac{1}{\gamma}(y_2+y_0)^2\right]}dy_2, \end{aligned} \tag{2.56}$$

cuja solução é

$$\begin{aligned} I_2 = c_2\left(\frac{m\,n}{2\pi\, i\,\hbar t}\right)^{-1/2} c_1\left(\frac{m\,n}{2\pi\, i\,\hbar t}\right)^{-1/2}\times \\ \times e^{\frac{im\,n}{2\hbar t}\left[(y_3^2+(1-1/\gamma)y_0^2)-\left(\frac{1}{(\gamma-\frac{1}{\gamma})}\right)\left(y_3+\left(\frac{1}{\gamma}\right)y_0\right)^2\right]}, \end{aligned} \tag{2.57}$$

onde $c_2=\sqrt{\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\gamma}}}$. Este procedimento é repetido para todo y_k até y_{n-1}.

Após poucas integrações um padrão já aparece. A p-ésima constante c_p, pode ser escrita como:

$$c_p=\sqrt{\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\ddots_p}}}}, \tag{2.58}$$

onde o símbolo p indica que o padrão segue até o p-ésimo denominador. O radicando em 2.58 é reconhecido como a p-ésima aproximação parcial da *fração contínua*,

$$c_\infty^2=\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\ddots}}}, \tag{2.59}$$

onde a fração extende-se a um número infinito de denominadores. Após $n-1$ integrações, o resultado do processo de integração multiplicado pelo fator normalizante $(m\,n/2\pi\,i\,\hbar t)^{n/2}$ é

$$c_{n-1}c_{n-2}\cdots c_1\left(\frac{m\,n}{2\pi\, i\,\hbar t}\right)^{-(n-1)/2} e^{\frac{im\,n}{2\hbar t}\left[(y_n^2+F_{n-1}y_0^2)-c_{n-1}^2\left(y_n+\prod_{j=1}^{n-1}c_j^2 y_0\right)\right]}\times$$

$$\times \left(\frac{m\,n}{2\pi\, i\,\hbar t}\right)^{n/2}, \tag{2.60}$$

onde F_{n-1} é uma função finita de um número finito de aproximações parciais da fração contínua c_∞^2. Mas, como mancionamos anteriormente y_0 e y_n devem ser ambos nulos, portanto vale que

$$e^{\frac{im\,n}{2\hbar t}\left[(y_n^2+F_{n-1}y_0^2)-c_{n-1}^2\left(y_n+\prod_{j=1}^{n-1}c_j^2 y_0\right)\right]} = 1. \tag{2.61}$$

Assim, substituindo 2.60 em 2.49 o propagador fica

$$U_t(x,y) = \left(\frac{m}{2\pi\, i\,\hbar t}\right)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}S_{Cl}} \lim_{n\to\infty}\left[n\prod_{p=1}^{n-1} c_p^2\right]^{1/2}. \tag{2.62}$$

Escrevendo esta mesma expressão explicitamente em termos de γ vem

$$U_t(x,y) = \left(\frac{m}{2\pi\, i\,\hbar t}\right)^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar}S_{Cl}} \lim_{n\to\infty}\left[n\frac{1}{\gamma}\,\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\gamma}}\,\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\gamma}}}\cdots\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\gamma-\frac{1}{\ddots_{n-1}}}}}}\right]^{1/2}. \tag{2.63}$$

Resolver o limite que aparece em 2.63 não é trivial pois $\gamma = \gamma(n)$ (veja 2.55). Após um enfadonho trabalho, utilizando um recurso de computação algébrica, é possível mostrar que

$$\lim_{n\to\infty}\left[n\prod_{p=1}^{n-1} c_p^2\right]^{1/2} = \sqrt{\frac{\omega t}{\sin(\omega t)}}. \tag{2.64}$$

Usando o limite 2.64 teremos que a forma final para o propagador do OHS unidimensional será

$$U_t(x,y) = \left(\frac{m\omega}{2\pi\, i\,\hbar\sin(\omega t)}\right)^{1/2} e^{\frac{i\,m\omega}{2\hbar\sin(\omega t)}\left[(x^2+y^2)\cos(\omega t)-2xy\right]}. \tag{2.65}$$

$\square$

2.11 Um paralelo com o Movimento Browniano

O movimento Browniano unidimensional (começando no ponto $x_0 \in \mathbb{R}$) é processo descrito por uma família X_t, $t \geq 0$, que ,"simplificadamente", afirma que a probabilidade de encontrar uma partícula na reta no tempo t na intervalo $[a,b]$, dado que no tempo 0 estava em x_0, é dada por

$$\int_a^b \frac{1}{\sqrt{t}\,\sqrt{2\pi}}\, e^{\frac{-(x-x_0)^2}{2\,t}}\, dx = P(X_t \in [a,b]).$$

Referimos o leitor a [190] e [200] para uma descriçao mais completa, precisa e formal do assunto.

Note que quando t se aproxima de zero a probabilidade associada a X_t se aproxima da Delta Dirac em x_0. A densidade de probabilidade $\frac{1}{\sqrt{t}\,\sqrt{2\pi}}\, e^{\frac{-(x-x_0)^2}{2\,t}}$ descreve uma Gaussiana de média x_0 e variância $\sqrt{t}$. A medida que t cresce a partícula tem maior probabilidade de ser encontrada em regiões mais distantes de x_0. A analogia com a partícula livre da Mecânica Quântica é transparente.

Note que $\phi(t,x) = \frac{1}{\sqrt{t}\,\sqrt{2\pi}}\, e^{\frac{-(x-x_0)^2}{2\,t}}$ satisfaz a equação do calor

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{2}\,\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}.$$

Considere uma função continua $V : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$. Então, existe uma função $Q(x,t)$, tal que, para todo t e todo intervalo $[a,b]$

$$E\,\{e^{\int_0^t V(X_t)}\, :\, X_t \in [a,b]\,\} = \int_a^b Q(t,x)dx.$$

A função $Q(x,t)$ satisfaz (ver chapter 15 em [201] e [189]) a equação parcial

$$\frac{\partial Q}{\partial t} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 Q}{\partial x^2} + V\,Q.$$

Em resumo, existe uma certa analogia entre a Teoria das Difusões em Processos Estocásticos ([201] chapter 15.11) e a Mecânica Quântica (ver ver Lecture 14 in [66]). Na equação diferencial parcial associada a cada correspondente sistema existe uma mudança de sinal, ou seja, $\frac{1}{2}\frac{\partial^2 Q}{\partial x^2}$ troca para $-\frac{1}{2}\frac{\partial^2 Q}{\partial x^2}$.

Para todo t fixo, o operador $e^{t\,\frac{1}{2}\frac{\partial^2 Q}{\partial x^2}}$, é estocástico (leva densidades em densidades). Na Mecânica Quântica os operadores unitários (por exemplo $e^{t\,i\,\frac{1}{2}\frac{\partial^2 Q}{\partial x^2}}$) desempenham o papel dos operadores estocásticos (levando elementos da bola unitária do espaço de Hilbert no mesmo conjunto).

Os estados estacionários da Mecânica Quântica são os análogos dos estados estacionários da Teoria dos Processos de Difusão (ver [201] chapter 15.5)

Os caminhos que trata a integral de Feymann desempenham um papel similar aos caminhos amostrais do movimento Browniano (ver [200]). O teorema de Feymann-Kac (ver [157] Theorem 20.3, [333] ou [201] chapter 15) descreve um resultado de fundamental importância na Teoria dos Processos Estocásticos e possui forte analogia com o que descrevemos na seção anterior. Referimos o leitor a [65], [189], [64], [203] e [92] que são referências muito interessantes que exploram a analogia existente entre os resultados de uma e outra teoria.

A formulação da Mecânica Quântica Estocástica de Nelson (ver [280], [257], [141], [263], [262], [341]) tenta descrever a evolução dinâmica de $|\varphi|^2$ onde φ é um estado. Ou seja, em princípio não se está interessado na fase do estado φ.

Nesta formulação se considera a equação diferencial estocástica (uma equação de um processo de difusão)

$$D\,X = V dt + D\,dt\, + \frac{\hbar}{2\,m} D\,B_t, \;\; t \geq 0,$$

onde V é o potencial, D uma constante e $d\,B_t$ é o derivado do movimento Browniano.

Dada uma condição inicial $\tilde{\rho} = |\varphi|^2$, se está interessado na evolução temporal $\tilde{\rho}_t, = |\varphi_t|^2$, $t \geq 0$, onde φ_t é a evolução dinamica do semigrupo $e^{\frac{-t\,i}{\hbar}\mathbf{H}}$ associado ao Hamiltoniano $\mathbf{H}$. Esta evolução de $\tilde{\rho}_t$, $t \geq 0$, é descrita por uma equação diferencial parcial conforme [82] (ver também Teorema 2.44 mais ao fim do texto).

Uma resultado interessante descrevendo a quantização natural de uma cadeia de Markov com tempo continuo e estado discreto ao cenário quantico aparece em [153]. Este ultimo vai corresponder a descrição de uma cadeia de spin quanticos sob a ação de um certo Hamiltoniano.

2.12 Integral de caminho na Mecânica Estatística Quântica

Vamos agora derivar uma representação por integrais de caminho para o núcleo integral de $\exp\left[-\frac{\beta}{\hbar}H\right]$. Esta expressão aparece em Mecânica Estatística Quântica.

Considere o sistema descrito pelo Hamiltoniano $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$. Para obtermos uma representação para o núcleo integral de $\exp\left[-\frac{\beta}{\hbar}\mathbf{H}\right]$ por integrais de caminho basta notar que este operador é exatamente igual ao operador de evolução temporal, $U(t) = \exp\left[-i\frac{Ht}{\hbar}\right]$, se pensarmos em β como um tempo imaginário, i.e., se fizermos $t = -i\beta$.
Seguindo a "receita"da seção 2.9, obtemos, pela fórmula de Trotter

$$e^{\lambda(A+B)} = \text{s-}\lim_{n\to\infty}\left(e^{\frac{\lambda}{n}}e^{\frac{\lambda}{n}B}\right)^n,$$

que o operador $\exp\left[-\frac{\beta}{\hbar}H\right]$ pode ser escrito como

$$e^{-\frac{\beta}{\hbar}H} = e^{\frac{\beta\hbar}{2m}\Delta-\frac{\beta}{\hbar}V(x)} = \text{s-}\lim_{n\to\infty}K_n^n, \tag{2.66}$$

onde $K_n = \exp\left[\frac{\beta\hbar}{2mn}\Delta\right]\exp\left[-\frac{\beta}{\hbar n}V(x)\right]$.
Lembramos que dados dois operadores integrais $\mathcal{K}_1$ e $\mathcal{K}_2$, cujos núcleos integrais são K_1 e K_2 respectivamente, temos que o núcleo integral de $\mathcal{K} = \mathcal{K}_1\mathcal{K}_2$ é

$$K(x,y) = \int_{\mathbb{R}^d} K_2(x,z)\,K_1(z,y)\,dz.$$

Logo podemos escrever

$$e^{-\frac{\beta}{\hbar}H}(x,y) = \lim_{n\to\infty}\int_{\mathbb{R}^d}...\int_{\mathbb{R}^d} K_n(x,x_{n-1})...K_n(x_1,y)\,dx_{n-1}...dx_1, \tag{2.67}$$

onde $K_n(x,y)$ é o núcleo integral de K_n. Como os núcleos de $e^{i\frac{\hbar t}{2mn}\Delta}$ e $e^{-i\frac{t}{\hbar n}V}$ são, respectivamente

$$\left(\frac{2\pi i\hbar t}{mn}\right)^{-\frac{d}{2}}\exp\left[\frac{imn|x-y|^2}{2\hbar t}\right] \qquad \text{e} \qquad \exp\left[-i\frac{t}{\hbar n}V(x)\right]\delta_y(x),$$

obtemos, fazendo $t = -i\beta$,

$$e^{\frac{\beta\hbar}{2mn}\Delta}(x,y) = \left(\frac{2\pi\hbar\beta}{mn}\right)^{-\frac{d}{2}} \exp\left[\frac{-mn|x-y|^2}{2\hbar\beta}\right]$$

e

$$e^{-\frac{\beta}{\hbar n}V}(x,y) = \exp\left[-\frac{\beta}{\hbar n}V(x)\right]\delta_y(x).$$

As expressões acima nos permitem escrever (2.67) como

$$e^{-\frac{\beta}{\hbar}H}(x,y) = \lim_{n\to\infty}\int_{\mathbb{R}^d}\dots\int_{\mathbb{R}^d}\left(\frac{2\pi\beta\hbar}{m}\right)^{-n\frac{d}{2}} \exp\left[-\frac{S_{en}}{\hbar}\right]dx_1\dots dx_{n-1}, \tag{2.68}$$

onde

$$S_{en} = \sum_{k=0}^{n-1}\frac{mn|x_{k+1}-x_k|^2}{2\beta} + V(x_k)\frac{\beta}{n},$$

com $x_0 = x$ e $x_n = y$.
Definindo a função poligonal ϕ_n, linear em $\left(\frac{k\beta}{n}, \frac{(k+1)\beta}{n}\right)$, $k = 0, 1, \dots, n-1$, tal que $\phi_n\left(\frac{k\beta}{n}\right) = x_k$, $k = 0, 1, \dots, n$, vemos que S_{en} é uma soma de Riemann da integral

$$S_e(\phi_n, \beta) = \int_0^\beta \left[\frac{m}{2}|\dot{\phi}(s)|^2 + V(\phi(s))\right]ds. \tag{2.69}$$

Mostramos, assim, que

$$e^{-\frac{\beta}{\hbar}H}(x,y) = \lim_{n\to\infty}\int_{P^n_{x,y,\beta}} \exp\left[-\frac{S_{en}}{\hbar}\right]D\phi_n = \text{(formal)}$$

$$\int_{P_{x,y,\beta}} \exp\left[-\frac{S_e(\phi,\beta)}{\hbar}\right]D\phi \tag{2.70}$$

onde $P^n_{x,y,\beta}$ é o espaço dos caminhos poligonais ϕ_n lineares em $\left(\frac{k\beta}{n}, \frac{(k+1)\beta}{n}\right)$, $k = 0, 1, \dots, n-1$, tais que $\phi_n(0) = x$ e $\phi_n(\beta) = y$,

$$D\phi_n = \left(\frac{2\pi\hbar\beta}{mn}\right)^{-n\frac{d}{2}} d\phi_n\left(\frac{\beta}{n}\right)\dots d\phi_n\left(\frac{(n-1)\beta}{n}\right),$$

$P_{x,y,\beta}$ é o espaço de caminhos de x a y (em tempo imaginário β) e $D\phi$ representa **formalmente** uma medida neste espaço.

3. Usando o resultado anterior vamos calcular $Z(\beta) = \operatorname{tr} \exp\left[-\frac{\beta}{\hbar}H\right]$.

Lembrando que se K é uma função contínua em $\mathbb{R}^{2d}$, e o operador integral $\mathcal{K}$ (que tem núcleo é K) é trace class, então pela seção 1.10, temos que

$$\operatorname{tr}\mathcal{K} = \int_{\mathbb{R}^d} K(x,x)\,dx. \tag{2.71}$$

Encontramos anteriormente uma representação para o núcleo integral do operador $\exp\left[-\frac{\beta}{\hbar}H\right]$. Se este for contínuo temos, por (16)

$$Z(\beta) = \operatorname{tr} \exp\left[-\frac{\beta}{\hbar}H\right] =$$

$$\int_{\mathbb{R}^d} \exp\left[-\frac{\beta}{\hbar}H\right](x,x)\,dx =$$

$$\int_{\mathbb{R}^d} \left\{\int_{P_{x,x,\beta}} \exp\left[-\frac{S_e(\phi,\beta)}{\hbar}\right] D\phi\right\} dx.$$

Dizemos que um caminho $\phi : [0,\beta] \to \mathbb{R}^d$ é periódico e tem período β se $\phi(0) = \phi(\beta)$.

Se interpretamos a integral de caminhos (2.70) como a "soma"sobre todos os caminhos saindo de $x \in \mathbb{R}^d$ e chegando a $y \in \mathbb{R}^d$ em um tempo (imaginário) β, devemos interpretar a integral (2.71) como a soma sobre todos os caminhos saindo de algum ponto $x \in \mathbb{R}^d$, e voltando a este mesmo ponto, depois de um tempo β, ou seja, a soma sobre todos os caminhos periódicos com periodo β

$$Z(\beta) = \int_{\phi \text{ caminho com período } \beta} \exp\left[-\frac{S_e(\phi,\beta)}{\hbar}\right] D\phi. \tag{2.72}$$

O assintótico da expressão quando $\hbar \to 0$ esta associado ao método de Laplace.

2.13 Cálculo das Variações em espaços de funções

Nesta seção vamos apresentar brevemente vários cálculos que serão necessários nas seções subsequentes. Referimos o leitor a [156] para mais detalhes.

Vamos denotar por X um espaço de Banach real genérico e considerar um funcional $S : X \to \mathbb{R}$. Em cada exemplo vamos explicitar quem é o X a ser considerado. Em geral X é um espaço de funções. O espaço tangente no ponto $\psi \in X$ é denotado por $T_\psi(X)$.

Em algum momento futuro no texto o espaço X poderá denotar uma variedade diferenciável modelada em um espaço de Banach. Neste caso $T_\psi(X)$ não será isomorfo a X.

Abaixo, $a = (a_1, a_2, .., a_d)$, $a_k \in \mathbb{N}$, e $|a| = \sum_{k=1}^d a_k$. Vamos denotar ∂^a por $\partial^a = \partial_{x_1}^{a_1} \partial_{x_2}^{a_2} ... \partial_{x_d}^{a_d}$.

Definição 2.25. Seja B um domínio aberto em $\mathbb{R}^d$ e $s \in \mathbb{N}$. O espaço de Sobolev $H^s(B, \mathbb{R}^m)$ é o conjunto

$$H^s(B, \mathbb{R}^m) = \{\psi : B \to \mathbb{R}^m \,|\, \partial^a \psi \in \mathcal{L}^2(B, \mathbb{R}^m)), \,\forall a, \,|a| < s\},$$

Este espaço se torna um espaço de Hilbert mediante o produto interno [156] [345]

$$< \phi, \psi >= \sum_{|a|<s} < \partial^a \phi, \partial^a \psi > .$$

Dados $\phi \in X$ e $\xi, \eta \in T_\phi X$, denotaremos por $\phi_{\lambda,\mu} \in X$ a variação de ϕ nas direções ξ e η. A variação de ϕ apenas na direção ξ, $\phi_{\lambda,0}$, será denotada por ϕ_λ. Assumimos que $\phi_{0,0} = \phi$.

Por exemplo, fixado $\phi : [0, 2\pi] \to \mathbb{C}$ podemos considerar $\xi = \cos$ e $\eta = \sin$.

Assim, $\phi_{\lambda,\mu}(t) = \phi(t) + \lambda\, \xi(t) + \mu\, \eta(t) = \phi(t) + \lambda \,\cos(t) + \mu\, \sin(t)$. Esta em particular seria uma variação com extremos fixos.

Vamos assumir que estas variações são diferenciáveis e portanto para todo t

$$\frac{\partial}{\partial \lambda}\, \phi_{\lambda,\mu}|_{\lambda=0,\mu=0}(t) = \xi(t),$$

e

$$\frac{\partial}{\partial \mu}\, \phi_{\lambda,\mu}|_{\lambda=0,\mu=0}(t) = \eta(t).$$

Definição 2.26. Dada $S : X \to \mathbb{R}$ uma função definida em um espaço de Banach X considere um elemento ϕ fixado em X. Dizemos que S é diferenciável em ϕ, se existe um funcional linear em X, denotado por $\partial S(\phi) : X \to \mathbb{R}$ tal que para cada variação linear ϕ_λ de ϕ na direção ϵ, vale

$$\frac{d}{d\lambda} S(\phi_\lambda)|_{\lambda=0} = \partial S(\phi)(\epsilon).$$

Ou seja, só iremos considerar variações da forma $\lambda\epsilon + \mu\eta$, $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$.

Um funcional linear limitado num espaço de Hilbert é caracterizado por um vetor. Neste caso, denotamos tambem tal vetor por $\partial S(\phi)$. Assim, neste caso

$$\frac{d}{d\lambda} S(\phi_\lambda)|_{\lambda=0} =< \partial S(\phi), \epsilon > .$$

Este conceito é conhecido como derivada de Gâteaux.

Estamos interessados nos pontos críticos de S, ou seja, onde a derivada é zero.

Definição 2.27. Dada $S : X \to \mathbb{R}$ uma função definida em um espaço de Banach X considere um elemento ϕ fixado em X. Dizemos que S é duas vezes diferenciável em ϕ, se existe um funcional linear em $T_\phi X$ tomando valores em $(T_\phi X)^*$, denotado por $\partial^2 S(\phi)$ tal que para cada variação $\phi_{\lambda,\mu}$ de ϕ na direção ϵ e η, vale

$$\frac{\partial^2}{\partial\lambda\,\partial\mu} S(\phi_{\lambda,\mu})|_{\lambda=0,\mu=0} = [\partial^2 S(\phi)(\eta)]\ (\epsilon).$$

Um funcional linear limitado no espaço de Hilbert $T_\phi X$ é caracterizado por um vetor. Neste caso, para cada η, denotamos tambem tal vetor por $\partial S^2(\phi)\,(\eta)$. Assim, neste caso

$$\frac{\partial^2}{\partial\lambda\,\partial\mu} S(\phi_{\lambda,\mu})|_{\lambda=0,\mu=0} =< \partial^2 S(\phi)(\eta)\ ,\ \epsilon > .$$

Vamos ilustrar a teoria com vários exemplos interessantes. Alguns deles serão utilizados nas proximas seções.

1. $X = L^2\,([a,b]\,;\mathbb{R})$. Fixada $f \in X$, considere o funcional $S : X \to \mathbb{R}$ definido por

$$S\,[\phi] = \int_a^b f\,(x)\,\phi\,(x)\,dx.$$

A derivada variacional de S em ϕ é o funcional linear $\partial S_\phi : X \to \mathbb{R}$ dado por

$$\partial S_\phi [\xi] = \left.\frac{\partial S[\phi_\lambda]}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=0} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \int_a^b f(x)\, \phi_\lambda (x)\, dx \Big|_{\lambda=0}$$

$$= \int_a^b f(x) \left.\frac{\partial \phi_\lambda (x)}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=0} dx = \int_a^b f(x)\, \xi (x)\, dx$$

$$\Rightarrow \partial S_\phi [\xi] = \int_a^b f(x)\, \xi(x)\, dx.$$

2. A segunda variação de S em ϕ é a aplicação $S''_\phi : X \to (X)^*$, ou de maneira equivalente a forma bilinear $S''_\phi : X \times X \to \mathbb{R}$, definida por

$$S''_\phi (\eta, \xi) =$$

$$\left.\frac{\partial^2 S[\phi_{\lambda,\mu}]}{\partial \mu \partial \lambda}\right|_{\lambda=\mu=0} = \frac{\partial}{\partial \mu} \left[\partial S_{\phi_\mu} [\xi]\right]\Big|_{\mu=0} = \frac{\partial}{\partial \mu} \int_a^b f(x)\, \xi(x)\, dx \Big|_{\mu=0} = 0$$

$$\Rightarrow S''_\phi (\eta, \xi) = 0.$$

3. Dada $V : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ contínua tal que $V(0) = 0$, seja

$$X = \left\{\phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^m \mid \text{tem suporte compacto e} \, V \circ \phi \in L^1\left(\mathbb{R}^d\right)\right\}.$$

Considere o funcional $S : X \to \mathbb{R}$ definido por

$$S[\phi] = \int_{\mathbb{R}^d} V(\phi(x))\, dx.$$

A derivada variacional de S em ϕ é o funcional linear $\partial S_\phi : T_\phi X \to \mathbb{R}$ dado por

$$\partial S_\phi [\xi] = \left.\frac{\partial S[\phi_\lambda]}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=0} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \int_{\mathbb{R}^d} V(\phi_\lambda (x))\, dx \Big|_{\lambda=0}$$

$$= \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{j=1}^m \frac{\partial V}{\partial \phi_{\lambda_j}} \left.\frac{\partial \phi_{\lambda_j}}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=0} dx = \int_{\mathbb{R}^d} \langle \partial_\phi V, \xi \rangle\, dx$$

$$\Rightarrow \partial S_\phi [\xi] = \int_{\mathbb{R}^d} \left\langle \partial_{\phi(x)} V, \xi(x) \right\rangle dx,$$

onde $\partial_\phi V$ é um vetor do $\mathbb{R}^m$ cujas coordenandas são $\left.\frac{\partial V}{\partial \phi_j}\right|_\phi$ e $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota o produto interno usual do $\mathbb{R}^m$.

A segunda variação de S em ϕ é a aplicação $S''_\phi : T_\phi X \to (T_\phi X)^*$, ou de maneira equivalente a forma bilinear $S''_\phi : T_\phi X \times T_\phi X \to \mathbb{R}$, definida por

$$S''_\phi (\eta, \xi) = \left.\frac{\partial^2 S[\phi_{\lambda,\mu}]}{\partial \mu \partial \lambda}\right|_{\lambda=\mu=0} =$$

$$\left.\frac{\partial}{\partial \mu} \left[\partial S_{\phi_\mu} [\xi]\right]\right|_{\mu=0} =$$

$$\left.\frac{\partial}{\partial \mu} \int_{\mathbb{R}^d} \left\langle \partial_{\phi_\mu(x)} V, \xi(x) \right\rangle dx\right|_{\mu=0}$$

$$= \left.\int_{\mathbb{R}^d} \sum_{i,j=1}^m \frac{\partial \phi_{\mu_i}}{\partial \mu} \frac{\partial^2 V}{\partial \phi_{\mu_i} \partial \phi_{\mu_j}} \xi_i dx\right|_{\mu=0} = \int_{\mathbb{R}^d} \left\langle D^2_\phi V \eta, \xi \right\rangle dx$$

$$\Rightarrow S''_\phi (\eta, \xi) = \int_{\mathbb{R}^d} \left\langle D^2_{\phi(x)} V \eta(x), \xi(x) \right\rangle dx,$$

onde $D^2_\phi V$ é a matriz $m \times m$ cujos elementos são $\left.\frac{\partial^2 V}{\partial \phi_i \partial \phi_j}\right|_\phi$, ou seja a matriz Hessiana do potencial V em ϕ.

A expressão acima está bem definida num espaço de Banach. Se considerarmos a função S definida numa variedade modelada num espaço de Banach se pode obter o conceito análogo (e resultados semelhantes) mas isto não será tratado aqui (ver por exemplo [212]).

4. $X = H^1(\mathbb{R}^d)$. Considere o funcional $S : X \to \mathbb{R}$ definido por

$$S[\phi] = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{2} |\nabla \phi(x)|^2 dx.$$

A derivada variacional de S em ϕ é o funcional linear $\partial S_\phi : X \to \mathbb{R}$ dado por

$$\partial S_\phi [\xi] = \left.\frac{\partial S[\phi_\lambda]}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=0} =$$

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}\int_{\mathbb{R}^d}\frac{1}{2}|\nabla\phi_\lambda(x)|^2dx\Big|_{\lambda=0}=$$

$$\int_{\mathbb{R}^d}\left\langle\nabla\phi_\lambda,\nabla\frac{\partial\phi_\lambda}{\partial\lambda}\right\rangle\Big|_{\lambda=0}dx=\int_{\mathbb{R}^d}\langle\nabla\phi,\nabla\xi\rangle\,dx$$

$$=\underbrace{(\nabla\phi)\,\xi|_{\mathbb{R}^d}}_{=0}-\int_{\mathbb{R}^d}(\Delta\phi)\,\xi dx=\int_{\mathbb{R}^d}(-\Delta\phi)\,\xi dx$$

$$\Rightarrow\partial S_\phi[\xi]=\int_{\mathbb{R}^d}(-\Delta\phi(x))\,\xi(x)\,dx,$$

onde $\langle\cdot,\cdot\rangle$ denota o produto interno usual do $\mathbb{R}^d$. Aqui usamos que o produto $(\nabla\phi)\,\xi$ tende a zero no infinito, já que $\phi,\xi\in H^1\left(\mathbb{R}^d\right)$.

A segunda variação de S em ϕ é a aplicação $S''_\phi:X\to(X)^*$, ou de maneira equivalente a forma bilinear $S''_\phi:X\times X\to\mathbb{R}$, definida por

$$S''_\phi(\eta,\xi)=\frac{\partial^2S[\phi_{\lambda,\mu}]}{\partial\mu\partial\lambda}\Big|_{\lambda=\mu=0}=$$

$$\frac{\partial}{\partial\mu}\left[\partial S_{\phi_\mu}[\xi]\right]\Big|_{\mu=0}=\frac{\partial}{\partial\mu}\int_{\mathbb{R}^d}(-\Delta\phi_\mu(x))\,\xi(x)\,dx\Big|_{\mu=0}=$$

$$\int_{\mathbb{R}^d}\left(-\Delta\frac{\partial\phi_\mu}{\partial\mu}\right)\xi\Big|_{\mu=0}dx=\int_{\mathbb{R}^d}(-\Delta\eta)\,\xi dx$$

$$\Rightarrow S''_\phi(\eta,\xi)=\int_{\mathbb{R}^d}(-\Delta\eta(x))\,\xi(x)\,dx.$$

5. Sejam $a,b\in\mathbb{R}^m$, $X=\left\{\phi\in C^1([0,T];\mathbb{R}^m)\,/\phi(0)=a,\phi(T)=b\right\}$.

Seja $E=C^1((0,T],\mathbb{R}^m)$ que é um espaço de Banach com a norma C^1.

Então X é um subespaço fechado de E que também é de Banach.

Temos então $T_\phi X=\left\{\xi\in C^1([0,T];\mathbb{R}^m)\,/\xi(0)=\xi(T)=0\right\}$. Considere o funcional $S:X\to\mathbb{R}$ definido por

$$S[\phi]=\int_0^T\left[\frac{1}{2}m|\dot\phi(t)|^2-V(\phi(t))\right]dt,$$

"quantum2
2019/12/13
page 329

onde $V : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ é uma função contínua. A derivada variacional de S em ϕ é o funcional linear $\partial S_\phi : T_\phi X \to \mathbb{R}$ dado por

$$\partial S_\phi [\xi] = \left.\frac{\partial S[\phi_\lambda]}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=0} =$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda}\int_0^T \left[\frac{1}{2}m|\dot{\phi}_\lambda (t)|^2 - V(\phi_\lambda (t))\right] dt\Big|_{\lambda=0} =$$

$$\int_0^T \sum_{j=1}^m \left[m\dot{\phi}_{\lambda_j}\frac{\partial \dot{\phi}_{\lambda_j}}{\partial \lambda} - \frac{\partial V}{\partial \phi_{\lambda_j}}\frac{\partial \phi_{\lambda_j}}{\partial \lambda}\right]_{\lambda=0} dt =$$

$$= \int_0^T \left[m\left\langle \dot{\phi}, \dot{\xi}\right\rangle - \left\langle \partial_\phi V, \xi\right\rangle\right] dt =$$

$$\underbrace{m\left\langle \dot{\phi}, \xi\right\rangle\Big|_0^T}_{=0} + \int_0^T \left[-\left\langle m\ddot{\phi}, \xi\right\rangle - \left\langle \partial_\phi V, \xi\right\rangle\right] dt$$

$$= \int_0^T \left\langle -m\ddot{\phi} - \partial_\phi V, \xi\right\rangle dt$$

$$\Rightarrow \partial S_\phi [\xi] = \int_0^T \left\langle -m\ddot{\phi}(t) - \partial_{\phi(t)} V, \xi(t)\right\rangle dt,$$

onde $\partial_\phi V$ é um vetor do $\mathbb{R}^m$ cujas coordenandas são $\left.\frac{\partial V}{\partial \phi_j}\right|_\phi$ e $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota o produto interno usual do $\mathbb{R}^m$.

Tomando $\phi_{\lambda,\mu} = \phi_0 + \lambda\xi + \mu\eta$, obtemos $\frac{\partial \phi_{\lambda,\mu}}{d\lambda}|_{\lambda=0} = \xi$, para todo μ.

A segunda variação de S em ϕ é a aplicação $S''_\phi : T_\phi X \to (T_\phi X)^*$, ou de maneira equivalente a forma bilinear $S''_\phi : T_\phi X \times T_\phi X \to \mathbb{R}$, definida por

$$S''_\phi(\eta, \xi) = \left.\frac{\partial^2 S[\phi_{\lambda,\mu}]}{\partial \mu \partial \lambda}\right|_{\lambda=\mu=0} = \frac{\partial}{\partial \mu}\left[\partial S_{\phi_\lambda}[\xi]\right]\Big|_{\mu=0} =$$

$$\frac{\partial}{\partial \mu}\int_0^T \left\langle -m\ddot{\phi}_\mu (t) - \partial_{\phi_\mu} V(t), \xi(t)\right\rangle dt\Big|_{\mu=0} =$$

$$\int_0^T \sum_{j=1}^m \left[-m\frac{\partial \ddot{\phi}_{\mu_j}}{\partial \mu} - \sum_{i=1}^m \frac{\partial \phi_{\mu_i}}{\partial \mu}\frac{\partial^2 V}{\partial \phi_{\mu_i}\partial \phi_{\mu_j}}\right]\xi_j\Bigg|_{\mu=0} dt$$

$$= \int_0^T \left\langle -m\ddot{\eta} - D_\phi^2 V\eta, \xi \right\rangle dt$$

$$\Rightarrow S''_\phi(\eta,\xi) = \int_0^T \left\langle \left[-m\frac{d^2}{dt^2} - D^2_{\phi(t)}V \right] \eta(t), \xi(t) \right\rangle dt,$$

onde $D_\phi^2 V$ é a matriz $m \times m$ cujos elementos são $\left.\frac{\partial^2 V}{\partial\phi_i \partial\phi_j}\right|_\phi$, ou seja a matriz Hessiana do potencial V em ϕ.

6. X como em (**5**). Considere o funcional $S : X \to \mathbb{R}$ definido por

$$S[\phi] = \int_0^T L\left(\phi(t), \dot{\phi}(t)\right) dt,$$

onde $L : \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ é uma função duas vezes diferenciável. A derivada variacional de S em ϕ é o funcional linear $\partial S_\phi : T_\phi X \to \mathbb{R}$ dado por

$$\partial S_\phi[\xi] = \left.\frac{\partial S[\phi_\lambda]}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=0} = \frac{\partial}{\partial\lambda}\int_0^T L\left(\phi_\lambda(t), \dot{\phi}_\lambda(t)\right) dt\Big|_{\lambda=0} =$$

$$\int_0^T \frac{\partial}{\partial\lambda} L\left(\phi_\lambda, \dot{\phi}_\lambda\right)\Big|_{\lambda=0} dt = \int_0^T \sum_{j=1}^m \left[\frac{\partial L}{\partial\phi_{\lambda_j}}\frac{\partial\phi_{\lambda_j}}{\partial\lambda} + \frac{\partial L}{\partial\dot{\phi}_{\lambda_j}}\frac{\partial\dot{\phi}_{\lambda_j}}{\partial\lambda} \right]_{\lambda=0} dt =$$

$$\int_0^T \left[\langle \partial_\phi L, \xi\rangle + \left\langle \partial_{\dot{\phi}} L, \dot{\xi} \right\rangle \right] dt = \underbrace{\left\langle \partial_{\dot{\phi}} L, \xi \right\rangle\Big|_0^T}_{=0} + \int_0^T \left\langle \partial_\phi L - \frac{d}{dt}\partial_{\dot{\phi}} L, \xi \right\rangle dt =$$

$$\int_0^T \left\langle \partial_\phi L - \frac{d}{dt}\partial_{\dot{\phi}} L, \xi \right\rangle dt$$

$$\Rightarrow \partial S_\phi[\xi] = \int_0^T \left\langle \partial_\phi L\left(\phi(t), \dot{\phi}(t)\right) - \frac{d}{dt}\partial_{\dot{\phi}} L\left(\phi(t), \dot{\phi}(t)\right), \xi(t) \right\rangle dt,$$

onde $\partial_\phi L$ e $\partial_{\dot{\phi}} L$ são vetores do $\mathbb{R}^m$ cujas coordenadas são, respectivamente, $\left.\frac{\partial L}{\partial\phi_j}\right|_{(\phi,\dot{\phi})}$ e $\left.\frac{\partial L}{\partial\dot{\phi}_j}\right|_{(\phi,\dot{\phi})}$ e $\langle\cdot,\cdot\rangle$ denota o produto interno usual do $\mathbb{R}^m$.

A segunda variação de S em ϕ é a aplicação $S''_\phi : T_\phi X \to (T_\phi X)^*$, ou de maneira equivalente a forma bilinear $S''_\phi : T_\phi X \times T_\phi X \to \mathbb{R}$, definida por

$$S''_\phi(\eta,\xi) = \left.\frac{\partial^2 S[\phi_{\lambda,\mu}]}{\partial\mu\partial\lambda}\right|_{\lambda=\mu=0} = \frac{\partial}{\partial\mu}\left[\partial S_{\phi_\mu}[\xi]\right]\Big|_{\mu=0} =$$

$$\frac{\partial}{\partial\mu}\int_0^T \left\langle \partial_{\phi_\mu} L - \frac{d}{dt}\partial_{\dot{\phi}_\mu} L, \xi \right\rangle dt\Big|_{\mu=0} =$$

$$\int_0^T \sum_{j=1}^{m}\left[\sum_{i=1}^{m}\frac{\partial \phi_{\mu_i}}{\partial \mu}\frac{\partial^2 L}{\partial \phi_{\mu_i}\partial \phi_{\mu_j}} + \sum_{i=1}^{m}\frac{\partial \dot{\phi}_{\mu_i}}{\partial \mu}\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\phi}_{\mu_i}\partial \phi_{\mu_j}}\right.$$

$$\left. - \sum_{i=1}^{m}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \phi_{\mu_i}}{\partial \mu}\frac{\partial^2 L}{\partial \phi_{\mu_i}\partial \dot{\phi}_{\mu_j}}\right) - \sum_{i=1}^{m}\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \dot{\phi}_{\mu_i}}{\partial \mu}\frac{\partial^2 L}{\partial \dot{\phi}_{\mu_i}\partial \dot{\phi}_{\mu_j}}\right)\right]\xi_j\Big|_{\mu=0} dt =$$

$$\int_0^T \left\langle D_\phi^2 L\eta + D_{\dot{\phi}\phi}^2 L\dot{\eta} - \frac{d}{dt}\left[D_{\phi\dot{\phi}}^2 L\eta\right] - \frac{d}{dt}\left[D_{\dot{\phi}}^2 L\dot{\eta}\right], \xi \right\rangle dt$$

$$= \int_0^T \left\langle D_\phi^2 L\eta + \underbrace{D_{\dot{\phi}\phi}^2 L\dot{\eta} - D_{\phi\dot{\phi}}^2 L\dot{\eta}}_{=0} - \frac{d}{dt}\left[D_{\phi\dot{\phi}}^2 L\right]\eta - \frac{d}{dt}\left[D_{\dot{\phi}}^2 L\right]\dot{\eta} - D_{\dot{\phi}}^2 L\ddot{\eta}, \xi \right\rangle dt =$$

$$\int_0^T \left\langle D_\phi^2 L\eta - \frac{d}{dt}\left[D_{\phi\dot{\phi}}^2 L\right]\eta - \frac{d}{dt}\left[D_{\dot{\phi}}^2 L\right]\dot{\eta} - D_{\dot{\phi}}^2 L\ddot{\eta}, \xi \right\rangle dt$$

$$\Rightarrow S_\phi''(\eta,\xi) = \int_0^T \left\langle \left[D_\phi^2 L - \frac{d}{dt}\left(D_{\phi\dot{\phi}}^2 L\right) - \frac{d}{dt}\left(D_{\dot{\phi}}^2 L\right)\frac{d}{dt} - D_{\dot{\phi}}^2 L\frac{d^2}{dt^2}\right]\eta, \xi \right\rangle dt,$$

onde $D_\phi^2 L$, $D_{\phi\dot{\phi}}^2 L$, $D_{\dot{\phi}\phi}^2 L$ e $D_{\dot{\phi}}^2 L$ são matrizes $m\times m$ cujos elementos são, respectivamente, $\frac{\partial^2 L}{\partial\phi_i\partial\phi_j}\Big|_{(\phi,\dot{\phi})}$, $\frac{\partial^2 L}{\partial\phi_i\partial\dot{\phi}_j}\Big|_{(\phi,\dot{\phi})}$, $\frac{\partial^2 L}{\partial\dot{\phi}_i\partial\phi_j}\Big|_{(\phi,\dot{\phi})}$ $\frac{\partial^2 L}{\partial\dot{\phi}_i\partial\dot{\phi}_j}\Big|_{(\phi,\dot{\phi})}$. Aqui usamos que $D_{\phi\dot{\phi}}^2 L = D_{\dot{\phi}\phi}^2 L$ uma vez que L é duas vezes diferenciável.

7. Sejam $f, g \in H^1\left(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^m\right)$,

$$X = \left\{\phi \in H^1\left(\mathbb{R}^d \times [0,T], \mathbb{R}^m\right) / \phi(x,0) = f(x),\right.$$

$\phi(x,T) = g(x)\}$. Temos

$$T_\phi X = \left\{\xi \in H^1\left(\mathbb{R}^d \times [0,T], \mathbb{R}^m\right) / \xi(x,0) = \xi(x,T) = = 0\right\}.$$

Considere o funcional $S : X \to \mathbb{R}$ definido por

$$S[\phi] = \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d}\left[-\frac{1}{2}|\partial_t\phi(x,t)|^2 + \frac{1}{2}\|\nabla\phi(x,t)\|^2 + V(\phi(x,t))\right]dxdt,$$

onde $V : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ é uma função contínua, $|\cdot|$ é a norma euclidiana do $\mathbb{R}^m$ e $\|\cdot\|$ a norma euclidiana do $\mathbb{R}^{dm}$. A derivada variacional de S em ϕ é o funcional linear $\partial S_\phi : T_\phi X \to \mathbb{R}$ dado por

$$\partial S_\phi[\xi] = \frac{\partial S[\phi_\lambda]}{\partial\lambda}\Big|_{\lambda=0} = \frac{\partial}{\partial\lambda}\int_0^T\int_{\mathbb{R}^d}\left[-\frac{1}{2}|\partial_t\phi_\lambda|^2 + \frac{1}{2}\|\nabla\phi_\lambda\|^2 + V(\phi_\lambda)\right]dxdt\Big|_{\lambda=0} =$$

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{j=1}^m \left[-\frac{\partial \phi_{\lambda_j}}{\partial t} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \phi_{\lambda_j}}{\partial \lambda} \right) + \sum_{k=1}^d \left[\frac{\partial \phi_{\lambda_j}}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\partial \phi_{\lambda_j}}{\partial \lambda} \right) \right] \right.$$

$$\left. + \frac{\partial V}{\partial \phi_{\lambda_j}} \frac{\partial \phi_{\lambda_j}}{\partial \lambda} \right]_{\lambda=0} dxdt = \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{j=1}^m \left[-\frac{\partial \phi_j}{\partial t} \frac{\partial \xi_j}{\partial t} + \sum_{k=1}^d \left[\frac{\partial \phi_j}{\partial x_k} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_k} \right] \right.$$

$$\left. + \frac{\partial V}{\partial \phi_j} \xi_j \right] dxdt = \underbrace{\int_{\mathbb{R}^d} \sum_{j=1}^m -\frac{\partial \phi_j}{\partial t} \xi_j \bigg|_0^T dx}_{=0} + \underbrace{\int_0^T \sum_{j=1}^m \left(\nabla \phi_j \right) \xi_j \bigg|_{\mathbb{R}^d} dt}_{=0}$$

$$+ \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{j=1}^m \left[\frac{\partial^2 \phi_j}{\partial t^2} - \sum_{k=1}^d \left(\frac{\partial^2 \phi_j}{\partial x_k^2} \right) + \frac{\partial V}{\partial \phi_j} \right] \xi_j dxdt =$$

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \left[\left\langle \partial_t^2 \phi \ \ -\Delta \phi + \partial_\phi V, \xi \right\rangle \right] dxdt \Rightarrow$$

$$\partial S_\phi \left[\xi \right] = \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \left[\left\langle \Box \phi \left(x, t \right) + \partial_{\phi(x,t)} V, \xi \left(x, t \right) \right\rangle \right] dxdt,$$

onde $\partial_\phi V$ é um vetor do $\mathbb{R}^m$ cujas coordenandas são $\frac{\partial V}{\partial \phi_j}\Big|_\phi$, $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota o produto interno usual do $\mathbb{R}^m$ e $\Box = \partial_t^2 - \Delta$ é o D'Alambertiano. Aqui usamos que o produto $(\nabla \phi) \xi$ tende a zero no infinito para todo t, uma vez que $\phi, \xi \in H^1 \left(\mathbb{R}^d \times [0, T], \mathbb{R}^m \right)$.

A segunda variação de S em ϕ é a aplicação $S''_\phi : T_\phi X \to (T_\phi X)^*$, ou de maneira equivalente a forma bilinear $S''_\phi : T_\phi X \times T_\phi X \to \mathbb{R}$, definida por

$$S''_\phi \left(\eta, \xi \right) = \frac{\partial^2 S \left[\phi_{\lambda,\mu} \right]}{\partial \mu \partial \lambda} \bigg|_{\lambda=\mu=0} = \frac{\partial}{\partial \mu} \left[\partial S_{\phi_\mu} \left[\xi \right] \right] \bigg|_{\mu=0} =$$

$$\frac{\partial}{\partial \mu} \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \left[\left\langle \Box \phi_\mu + \partial_{\phi_\mu} V, \xi \right\rangle \right] dxdt \bigg|_{\mu=0}$$

$$= \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \sum_{j=1}^m \left[\Box \frac{\partial \phi_{\mu_j}}{\partial \mu} \xi_j + \sum_{i=1}^m \frac{\partial \phi_{\mu_i}}{\partial \mu} \frac{\partial^2 V}{\partial \phi_{\mu_i} \partial \phi_{\mu_j}} \xi_j \right]_{\mu=0} dxdt =$$

$$\int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \left\langle \Box \eta + D_\phi^2 V \eta, \xi \right\rangle dxdt$$

$$\Rightarrow S''_\phi \left(\eta, \xi \right) = \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} \left\langle \left[\Box + D^2_{\phi(x,t)} V \right] \eta \left(x, t \right), \xi \left(x, t \right) \right\rangle dt,$$

onde $D_\phi^2 V$ é a matriz $m \times m$ cujos elementos são $\frac{\partial^2 V}{\partial \phi_i \partial \phi_j}\Big|_\phi$, ou seja a matriz Hessiana do potencial V em ϕ.

8. Fixado B um operador auto-adjunto em um espaço de Hilbert real $\mathcal{H}$, $X = \mathcal{D}(B)$. Temos $T_\phi X = X$, pois X é um subespaço de $\mathcal{H}$. Considere o funcional $S : X \to \mathbb{R}$ definido por

$$S(\phi) = \frac{1}{2}\langle \phi, B\phi \rangle .$$

A derivada variacional de S em ϕ é o funcional linear $\partial S_\phi : X \to \mathbb{R}$ dado por

$$\partial S_\phi(\xi) = \left.\frac{\partial S(\phi_\lambda)}{\partial \lambda}\right|_{\lambda=0} = \left.\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\lambda}\langle \phi_\lambda, B\phi_\lambda\rangle\right|_{\lambda=0} =$$

$$\frac{1}{2}\left[\left\langle \frac{\partial \phi_\lambda}{\partial\lambda}, B\phi_\lambda \right\rangle + \left\langle \phi_\lambda, B\frac{\partial\phi_\lambda}{\partial\lambda}\right\rangle\right]_{\lambda=0} =$$

$$\frac{1}{2}\left[\langle \xi, B\phi\rangle + \langle\phi, B\xi\rangle\right] = \frac{1}{2}\left[\langle B\phi, \xi\rangle + \langle \phi, B\xi\rangle\right] = \langle B\phi, \xi\rangle$$

$$\Rightarrow \partial S_\phi(\xi) = \langle B\phi, \xi\rangle ,$$

onde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota o produto interno de $\mathcal{H}$.

A segunda variação de S em ϕ é a aplicação $S''_\phi : X \to (X)^*$, ou de maneira equivalente a forma bilinear $S''_\phi : X \times X \to \mathbb{R}$, definida por

$$S''_\phi(\eta, \xi) = \left.\frac{\partial^2 S(\phi_{\lambda,\mu})}{\partial\mu\partial\lambda}\right|_{\lambda=\mu=0} =$$

$$\left.\frac{\partial}{\partial\mu}\left[\partial S_{\phi_\mu}(\xi)\right]\right|_{\mu=0} = \left.\frac{\partial}{\partial\mu}\langle B\phi_\mu, \xi\rangle\right|_{\mu=0} =$$

$$= \left.\left\langle B\frac{\partial\phi_\mu}{\partial\mu}, \xi\right\rangle\right|_{\mu=0} = \langle B\eta, \xi\rangle$$

$$\Rightarrow S''_\phi(\eta, \xi) = \langle B\eta, \xi\rangle .$$

2.14 Comportamento assintótico da Integral de Feymann

Nesta seção x denota a variável usual na reta real.

Como dissemos antes ao determinar o kernel integral $U_t(x, y)$ estaremos determinando a ação de $e^{-iHt/\hbar}$ em estados ψ. Como vimos antes este problema está associado a uma integral de caminho. O objetivo desta seção é mostrar que quando $\hbar$ é pequeno então a contribuição principal desta integral está na vizinhança do caminho clássico que minimiza a ação. Ou seja, quando $\hbar$ é pequeno as trajetórias tem uma tendencia (maior probabilidade) de ficarem próximas da trajetória determinada pela Mecânica Clássica.

Considere fixados dois pontos $a, b \in \mathbb{R}^n$, $T > 0$, e vamos considerar abaixo apenas caminhos diferenciáveis por partes $\phi : [0, T] \to \mathbb{R}^n$ tais que $\phi(0) = a$ e $\phi(T) = b$.

Após a obtenção da Integral de Feymann, queremos determinar o comportamento assintótico da expressão

$$\int e^{iS(\phi)/h} d\phi$$

quando $h \to 0$. Note que

$$S[\phi] = \int_0^T [\frac{1}{2} m \dot{\phi}^2 - V(\phi(t))] dt,$$

e assim, no caso particular do oscilador harmônico $V(y) = mk\frac{1}{2} y^2$, onde k é a constante da mola. É importante considerar o caso em que $m \neq 1$.

$$S[\phi] = m \int_0^T [\frac{1}{2} |\dot{\phi}(t)|^2 - \frac{k}{2} \phi(t)^2] dt.$$

No caso geral (V qualquer) é natural, ao menos para o autor, supor que o potencial tenha ordem de magnitude da massa m (as "forças"que atuam deveriam ser da mesma grandeza). Mais exatamente assumimos na análise da questão um potencial linear em m. Ou seja, consideramos a seguir a família indexada por m

$$\frac{1}{2} m \dot{\phi}^2 - mV(\phi(t)),$$

onde V é um potencial fixo (que independe da massa).

Desejamos estimar o comportamento assintótico de $\int_{\mathbb{R}^d} e^{i\,S(x)/h} dx$ quando $m \to \infty$. Isto nos dará (num certo sentido) no limite semiclássico o setting Newtoniano (clássico). Ou seja, o princípio de mínima ação vai aparecer de uma maneira natural.

É usual na literatura considerar, e faremos o mesmo aqui, que a massa é igual a 1 (está normalizada) e fazer a "constante"$\hbar$ ir a zero. Os dois procedimentos resultam no mesmo resultado final se S tem a forma

$$\frac{1}{\hbar} S[\phi] = \frac{1}{\hbar} \int_0^T [\frac{1}{2} m \, \dot{\phi}^2 - m \, V(\phi(t))] dt. = \frac{m}{\hbar} \int_0^T [\frac{1}{2} \, \dot{\phi}^2 - \, V(\phi(t))] dt.$$

Será necessário considerar agora na analise assintótica da integral de Feymann o Método da fase estacionária (ver seção 6.5.2 em [66], Cap 3 seção 3 em [90] ou [251], [270], [255] [309] [156] [115] [229] [98] [351] [166] [203]).

Observamos que nosso procedimento (talvez não usual) de multiplicar o potencial V pela massa, e então fazer a massa ir a infinito, faz sentido do ponto de vista matemático para o uso do Método da fase estacionária. Não estamos afirmando nada sobre a validade física de tal desenvolvimento. Nosso procedimento não é *standard* na teoria.

A idéia básica é que quando $h \to 0$, o integrando é muito oscilatório e contribui muito pouco, exceto quando $\nabla S(\phi) = 0$, ou seja, nos pontos críticos. Em outras palavras, as probabilidades tem maior magnitude perto dos pontos críticos. Este é o ponto central do desenvolvimento a seguir.

Estamos interessados nos caminhos críticos para a ação clássica.

Vamos estudar mais geralmente a seguinte função:

$$I(h) := \int f(\phi) e^{iS(\phi)/h} d\phi$$

onde $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$.

A parte "oscilatória' do "estado", um dos principais determinantes do comportamento de uma partícula na "Mecânica Quântica", desaparece no limite semiclássico, determinando assim, no mundo da "Mecânica Clássica", a sua ausência. Este desaparecimento segue do princípio de autocancelamento inerente ao método da fase estacionária (ver figura 2.4).

Vamos mostrar que se existe um caminho $\bar{\phi}$ que é o único mínimo para a ação clássica S então, quando $\hbar \to 0$, teremos que a integral I

pode ser aproximadamente expressa pelo seu valor neste caminho (sem integração).

Uma boa referencia para o método da fase estacionária em Mecânica Quântica é [94].

Para facilitar vamos pensar, inicialmente, que ϕ descreve a variável do espaço $\mathbb{R}^n$ e $S : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ é de classe C^2. O que faremos, inicialmente, é pensar que estamos considerando apenas os caminhos poligonais constituidos por n segmentos de reta. Ou seja, $x(t)$ é linear por partes (em cada intervalo da forma $(j\,\frac{T}{n}, (j+1)\,\frac{T}{n}), 0 \leq j \leq n-1$, n, T fixos). Denotamos assim $\phi_j = x(j\,\frac{T}{n})$. Assim, reduzimos um problema com variações em dimensão infinita (os possiveis caminhos gerais $x(t)$) a um com dimensão finita n. Neste caso se pode usar diretamente o resultado que aparece nos textos canônicos (por exemplo, [255]).

Vamos considerar o caso em que S tem um único ponto de mínimo isolado (que será assim crítico), digamos $\bar{\phi}$, não degenerado ($detS''(\bar{\phi}) \neq 0$), e que o suporte de f contém $\bar{\phi}$. Expandindo $S(\phi)$ até ordem 2 em torno de $\bar{\phi}$ e escrevendo $\phi - \bar{\phi} = \sqrt{h}\alpha$ obtemos que

$$\frac{S(\phi)}{h} = \frac{S(\bar{\phi})}{h} + \frac{1}{2}\langle \alpha, S''(\bar{\phi})\alpha \rangle + O(\sqrt{h}\,|\alpha|^3)$$

Portanto

$$I(h) = h^{d/2} e^{iS(\bar{\phi})/h} \int_{\mathbb{R}^d} f(\bar{\phi} + \sqrt{h}\alpha) e^{i\langle \alpha, S\,''(\bar{\phi})\alpha\rangle/2} e^{iO(\sqrt{h}\,|\alpha|^3)} d\alpha$$

E usando a expressão

$$\lim_{R\to\infty} \int_{|\alpha|\leq R} e^{i\langle \alpha, S\,''(\bar{\phi})\alpha\rangle/2} d\alpha = (2\pi i)^{d/2} [detS\,''(\bar{\phi})]^{-1/2}$$

Obtemos que

$$I(h) = (2\pi i h)^{d/2} [\det S''(\bar{\phi})]^{-1/2} f(\bar{\phi}) e^{iS(\bar{\phi})/h} [1 + O(\sqrt{h})]. \qquad (2.73)$$

Acima no cálculo que foi feito a integral foi dividida em duas: a integral na bola $B(\bar{\phi}, R)$ e no complemento da bola. No complementar da bola a integral é de decrescimento rápido em h porque, pela hipótese, S não tem pontos críticos aí.

Desta forma se existe um caminho $\bar{\phi}$ que é o único mínimo estrito para a ação clássica S então, quando $\hbar \to 0$, pelo método da fase estacionária obtemos que a integral I tem uma expressão analítica (ver

acima) expressa (aproximadamente) pelo seu valor neste caminho $\bar{\phi}$ (sem integração).

S'' é chamado de **operador Hessiano**. Para saber se um certo caminho crítico ϕ é mínimo para S (a ação) será necessario investigar se S'' é um operador positivo (no sentido definido na introdução do texto). Este procedimento é similar ao estudo de máximos e mínimos de funções diferenciáveis definidas em $\mathbb{R}$.

Vamos necessitar obter um definição de determinante de S'' para um operador S bem geral.

Se houver mais de um ponto crítico ϕ para S então deveremos somar a expressão acima considerando todos os pontos críticos para S.

Note que para $S : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ temos que

$$\lim_{h\to 0} h \ln \int e^{iS(\phi)/h} d\phi = iS(\bar{\phi}) = i \inf_{\phi}\{S(\phi)\}.$$

A expressão acima descreve o resultado essencial no método da fase estacionária: $\int e^{iS(\phi)/h} d\phi \sim e^{h\, i \inf_\phi \{S(\phi)\}}$, quando $h \to 0$.

Este comportamento é bem compreendido num espaço finito dimensional [251], ou seja $S : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, em razão do determinante ser algo muito bem definido. Um resultado similar vale no caso de dimensão infinita mas para isto devemos explicar o que é o determinante nesta situação (quando existe).

Desejamos obter o resultado: considere o conjunto dos caminhos (diferenciáveis por partes) $\phi : [0, T] \to \mathbb{R}^n$ tais que $\phi(0) = a$ e $\phi(T) = b$ e $S(\phi)$ a ação do caminho ϕ. Então,

$$\lim_{h\to 0} h \ln \int e^{iS(\phi)/h} d\phi = iS(\bar{\phi}) = i \inf_{\phi}\{S(\phi)\}.$$

Desta forma, quando h é pequeno, a contribuição principal da integral $\int e^{iS(\phi)/h} d\phi$ seria devida aos caminhos ϕ onde $\int_0^T \frac{1}{2}\, m\, \dot{\phi}^2(t) - m\, V(\phi(t))\, dt$ é mínima (entre aqueles tais que $\phi(0) = a$ e $\phi(T) = b$). Isto num certo sentido justificaria o princípio de mínima ação da Mecânica Clássica.

Suponha que $A = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k P_{\psi_k}$, $\lambda_k \in \mathbb{R}$. Sabemos que se B for escrito em série de potências $f(z) = \sum_n a_n z^n$ em A, ou seja, $B = f(A)$, então

$B = \sum_n a_n A^n = \sum_k f(\lambda_k) P_{\psi_k}$. Sendo assim, denominamos de $A^{-s} = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-s} P_{\psi_k}$.

Desejamos definir o determinante de um operador A geral e para isto necessitamos primeiro definir o traço de A^{-s} onde s é um parametro real.

Observe que se P é uma projeção então $e^{\mu P} = e^{\mu}\, P$. Logo,

$$\int_0^{\infty} t^{s-1}\, e^{-A\,t}\, dt = \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^{\infty} t^{s-1}\, e^{-t\,\lambda_k}\, P_{\psi_k}\, dt,$$

porque se P , P' são projeções e $P\,P' = P'\,P = 0$, então $e^{aP+bP'} = e^a\, P + e^b P'$.

Sendo assim, para $s > 0$.

$$\int_0^{\infty} t^{s-1}\, e^{-A\,t}\, dt = \Gamma(s) \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-s} P_{\psi_k} \; = \Gamma(s)\, A^{-s}.$$

Como

$$\lambda^{-s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} t^{s-1}\, e^{-\lambda\,t}\, dt,$$

onde $\Gamma(s)$ é a função Gamma no ponto $s > 0$, é natural escrever

$$A^{-s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^{\infty} t^{s-1}\, e^{-A\,t}\, dt.$$

Voltando ao caso finito dimensional, se A for diagonalizável $A = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k P_{\psi_k}$, $\lambda_k \in \mathbb{R}$, então, considere a função zeta associada

$$\zeta_A(s) = \text{ traço } (A^{-s}) = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k^{-s}.$$

Note que

$$\frac{d}{ds} \zeta_A(s)|_{s=0} = - \sum_{k=1}^{n} \log(\lambda_k).$$

Assim,

$$\det\, (A) = e^{-\zeta_A'(0)}.$$

Suponha agora que $A = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k P_{\psi_k}$, $\lambda_k \in \mathbb{R}$, e, da mesma forma, considere a função zeta associada

$$\zeta_A(s) = \text{ traço } (A^{-s}) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-s}.$$

Observe que somente se para certas famílias de λ_k estará bem definido tal expressão. Por exemplo, se λ_k vai a infinito como k^2, então, para s com parte real maior que $1/2$ a série $\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-s}$ converge. Este caso por exemplo ocorre para a partícula livre como vimos. Já no caso do oscilador harmônico temos que λ_k vai a infinito como k, e assim, para s com parte real maior que 1 a série $\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-s}$ converge.

Note que, formalmente,

$$\frac{d}{ds}\zeta_A(s)|_{s=0} = -\sum_{k=1}^{\infty} \log(\lambda_k).$$

O problema é que, por exemplo, nas duas situações descritas acima a função $\zeta_A(s)$ não está definida numa vizinhaça de $s = 0$.

Assim, necessitamos de uma extensão analítica de $\zeta_A(s)$ no plano complexo a uma vizinhaça de $s = 0$ para então poder afirmar que

$$\det\ (A) = e^{-\zeta_A'(0)}.$$

Pode-se mostrar que em várias situações é possivel obter esta extensão (ver [85]), e, claramente, isto depende apenas do crescimento assintótico dos λ_k, quando k vai a infinito. Esta questão envolve muitas tecnicalidades e não será abordada aqui.

Iremos agora analisar o método da fase estacionária no caso Quântico [309].

Vamos agora aplicar o método esboçado acima no caso em que S é a ação associada ao Hamiltoniano $\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(x)$.

Lembre que da seção anterior, para um caminho $\phi : [0,t] \to \mathbb{R}^n$ fixo, obtivemos que

$$S_\phi''(\eta, \xi) = \int_0^t \left\langle \left[-m\frac{d^2}{dt^2} - D^2_{\phi(s)}V \right] \eta\,(s)\,, \xi\,(s) \right\rangle ds.$$

Assim, $S_\phi{}'' = S''(\phi) = -m\frac{\partial^2}{\partial s^2} - V_\phi{}''$. Este operador age em $\eta(s)$, $s \in [0,t]$.

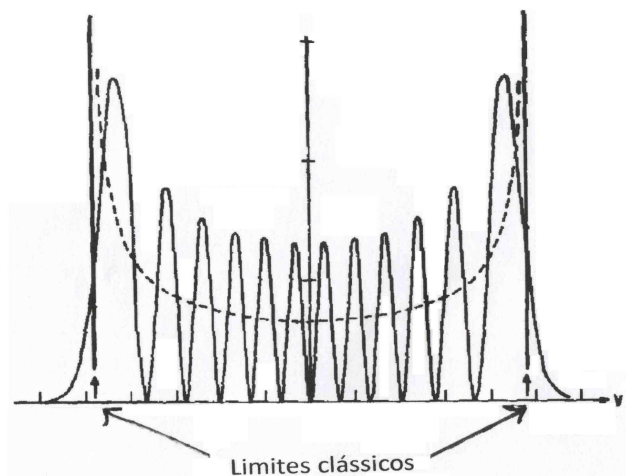



Figura 2.4: A linha pontilhada descreve o tempo de ocupação assintótica da partícula no nível de energia E segundo a Mecânica Clássica. A linha cheia descreve a densidade $|\psi|^2$ associada a um estado ψ que se encontra neste mesmo nível de energia E quando $\hbar$ é muito pequeno (massa grande).

Lembre que a integral de Feynman é expressa por

$$e^{-\mathbf{H}t/\hbar}(x,y) = \int_{P(x,y,t)} e^{iS(\phi)/\hbar} D\phi.$$

Note $\frac{S(\phi,t)}{\hbar} = \frac{\int_0^t \left\{\frac{m}{2}|\phi'(s)|^2 - m\,V(\phi(s))\right\} ds}{\hbar}$ contem a massa m no numerador.

Considere um caminho ϕ que é o único mínimo para a ação S no tempo de 0 a t ligando x a y. Vamos supor em alguns casos a frente que S'' é positivo definido. Se t é pequeno e x está próximo de y pode se mostrar que isto ocorre [156] (ver também proposição 2.37). De fato, seja ϕ fixo e considere o problema de Sturm-Liouville $x(0) = 0$, $x(t) = 0$, $s \in [0,t]$

$$mx''(s) + V''(\phi(s))\,x(s) = \lambda x(s).$$

Uma referencia geral sobre problemas de Sturm-Liouville é [53].

A situação ideal é quando só existem autovalores negativos (assim, positivos para $x \to -mx''(s) - V''(\phi(s))\,x(s)$).

No espaço $L^2[0,t]$, com condições de fronteira $x(0) = 0$, $x(t) = 0$, o operador autoadjunto $x \to mx'' + (V'' \circ \phi)\, x = -S''(x)$ tem apenas espectro pontual e possue um conjunto de autovalores estritamente negativos se t é pequeno. Supondo o valor de t pequeno, segue que S'' é positivo definido (ver começo da próxima seção) quando agindo em caminhos definidos em $[0,t]$. Quando considerarmos valores de t maiores pode ocorrer a existência de pontos conjugados, e, após isto a existência de alguns autovalores negativos para o operador S'' (considerado como agindo em caminhos definidos em $[0,t]$). Neste caso S'' não é mais positivo definido e o caminho ϕ crítico deixa de ser mínimo local. Para analisar tal questão é natural considerar os campos de Jacobi [305] (seção 12) e [156]. Vamos elaborar sobre isto na próxima seção.

Considere por exemplo um potencial quadrático da forma

$$V(y) = K\, y^2 + \epsilon y^3 + ...,$$

onde ϵ é pequeno e K é grande e positivo. Considere $\phi : [0,t] \to \mathbb{R}$ fixo com t também fixo.

Desta forma devemos considerar $x(0) = 0$, $x(t) = 0$, $s \in [0,t]$

$$mx''(s) + [2\, K + 6\, \epsilon(\phi(s)) + ...]\, x(s) = 2\, \lambda x(s).$$

Se ϵ fosse zero então a equação seria

$$mx''(s) + 2\, (K - \lambda) x(s) = 0.$$

Suponha λ seja tal q que $K - \lambda < 0$, então a solução geral da e.d.o. linear seria da forma

$$x(s) = a e^{s\lambda_1} + b e^{\lambda_2 s},$$

com $\lambda_1 \neq \lambda_2$.

Sendo assim, se $x(0) = 0$, $x(t) = 0$ então x é nula. Este caso então não nos interessa.

Suponha λ negativo de tal forma que $K - \lambda > 0$, então a solução geral da e.d.o. linear seria da forma

$$x(s) = a \cos(\sqrt{\frac{K-\lambda}{m}}\; s) + b \sin(\sqrt{\frac{K-\lambda}{m}}\; s).$$

Se t é pequeno não existe $x(s)$ tal que $x(0) = 0$, $x(t) = 0$, e $mx''(s) + 2\,(K-\lambda)x(s) = 0$. Note que se t é grande, por exemplo, $t = \frac{\pi}{\sqrt{\frac{K-\lambda}{m}}}$, então,

$x : [0,t] \to \mathbb{R}$ dada por $x(s) = \cos(\sqrt{\frac{K-\lambda}{m}}\, s)$ define uma autofunção para $S''(\phi)$ tal que o autovalor λ é negativo, e, $x(0) = 0$, $x(t) = 0$. Se $t > \frac{\pi}{\sqrt{\frac{K-\lambda}{m}}}$ isto continua ocorrendo. Se, por exemplo, $t > 2\,\frac{\pi}{\sqrt{\frac{K-\lambda}{m}}}$, então vão haver duas autofunções linearmente independentes com autovalor negativo.

Em resumo, os autovalores do problema de Sturm-Liouville são, neste caso,

$$\lambda_n = K - m\,(\frac{n\,\Pi}{t})^2,\ n = 1, 2, 3, ...,$$

e portanto são todos negativos se $t > 0$ é pequeno.

Pelo que vimos acima, para t fixo, tomando λ bem negativo vai existir um conjunto de dimensão finita de autofunções com autovalor λ. Estes autovalores λ são em número enumerável e convergem a $-\infty$.

No presente caso, no entanto, o t é pequeno e fixo, e temos assim que $S''(\phi)$ é positivo definido. Se V é da forma $V(y) = K\,y^2 + \epsilon y^3 + ...$, e, se ϵ é pequeno, um resultado similar pode ser obtido por perturbação do caso $V(y) = K\,y^2$. Assim, ϕ é mínimo local para variações de S e $\det S''$ é positivo.

Note que desejamos considerar a seguir o assintótico em m, quando $m \to \infty$, de $\frac{S(\phi,t)}{\hbar} = \frac{\int_0^t \left\{ \frac{m}{2} |\phi'(s)|^2 - m\,V(\phi(s)) \right\} ds}{\hbar}$ onde o numerador é linear na massa m.

Nosso ponto de vista, alternativamente, será considerar $m = 1$, ou seja,

$$\frac{S(\phi,t)}{\hbar} = \frac{\int_0^t \left\{ \frac{1}{2} |\phi'(s)|^2 -\ V(\phi(s)) \right\} ds}{\hbar},$$

e fazer $\hbar \to 0$.

Voltando ao problema inicial, a partir do descrito acima e (2.73)(no caso que f é a função constante 1), teremos que a expressão do kernel integral de $e^{-i\mathbf{H}t/h}$, quando h é pequeno, é

$$e^{-i\mathbf{H}t/h}(x,y) = (detS''(\bar{\phi}))^{-1/2} e^{iS(\bar{\phi})/h} (1 + O(\sqrt{h})). \qquad (2.74)$$

Acima estamos considerando que $\bar{\phi}$ é mínimo, S'' é visto como um operador, e, ainda, que o determinante que estamos mencionando acima é aquele determinado pela expressão obtida via função zeta apresentada

anteriormente. Isto trata de maneira adequada o caso em que t é pequeno.

Lembre que assumimos que os pontos críticos são todos não degenerados, ou seja, det $S''(\overline{\phi}) \neq 0$, se $\overline{\phi}$ é crítico.

Agora vamos considerar t grande e S agindo em caminhos definidos em $[0,t]$. Assim S'' já não é mais positivo definido.

Suponha agora que ϕ descreve os caminhos críticos ($S'_\phi = 0$) para a ação S, e, que são em número finito.

Assim,

$$e^{-i\mathbf{H}t/h}(x,y) = \sum_{\bar{\phi}} M_{\bar{\phi}} (detS''(\bar{\phi}))^{-1/2} e^{iS(\bar{\phi})/h} (1 + O(\sqrt{h})) \tag{2.75}$$

onde $M_{\bar{\phi}}$ é uma constante de normalização e a soma é feita sobre todos os pontos críticos da ação $S(\phi)$ ligando x a y e tempo t.

Vamos determinar $M := M_{\bar{\phi}}$, assumindo que é independente de $\bar{\phi}$ e de V. Para $V = 0$, sabemos que o kernel do operador é dado por

$$e^{-i\mathbf{H}_0 t/h}(x,y) = (2\pi iht/m)^{-d/2} e^{im|x-y|^2/2ht} \tag{2.76}$$

Como estamos supondo $\mathbf{H}_0 = -\triangle$, a ação se escreve

$$S_0(\phi) = \frac{1}{2} \int_0^t |\phi'(s)|^2 ds,$$

S_0 tem um único ponto crítico que é $\phi_0(s) = x + (y - x)s/t$. Então $S_0(\phi_0) = m|x - y|^2/2t$, e $S''(\phi_0) = -m\frac{\partial^2}{\partial s^2}$.

O acima descrito funciona para o caso $V = 0$.

Por outro lado, no caso $V \neq 0$, temos que

$$e^{-i\mathbf{H}_0 t/h}(x,y) = (2\pi iht/m)^{-d/2}\, e^{\frac{i}{h} S_0(\phi_0)}.$$

Portanto comparando (2.75) e (2.76) temos neste caso que

$$M = (det(-m\frac{\partial^2}{\partial s^2}))^{1/2} (2\pi iht/m)^{-d/2}$$

Logo

$$e^{-i\mathbf{H}t/h}(x,y) = \sum_{\bar{\phi}} \left(\frac{2\pi iht}{m}\right)^{-d/2} \left(\frac{det(-m\frac{\partial^2}{\partial s^2})}{detS''(\bar{\phi})}\right)^{1/2} e^{iS(\bar{\phi})/h}(1+O(\sqrt{h}))$$

quando $h \to 0$.

Apresentaremos agora uma demonstração mais rigorosa para a expressão

$$e^{-i\mathbf{H}t/h}(x,y) = \sum_{\bar{\phi}} \left(\frac{2\pi ith}{m}\right)^{-d/2} \left(\frac{det\hat{S}''_{\phi_0}}{detS''_{\bar{\phi}}}\right)^{1/2} e^{iS(\bar{\phi})/h} \left(1 + O\left(\sqrt{h}\right)\right)$$

quando $h \to 0$, onde S_ϕ é a ação clássica correspondente ao Hamiltoniano clássico H em um caminho ligando x a y em um tempo t, $\bar{\phi}$ é são pontos críticos de S, $S''_{\bar{\phi}}$ é a hessiana de S em um de seus pontos críticos, e, $\hat{S}''_{\phi_0} = -m\partial_s^2$ é a Hessiana da ação clássica da partícula livre no seu único ponto crítico $\phi_0(s) = x + (y-x)\,s/t$.

Supondo por simplicidade que S possui apenas um ponto crítico e notando que $S''_{\bar{\phi}}$ (é um operador que age nas funções nulas em 0 e t e que estão em $L^2([0,t])$) com condições de contorno de Dirichlet, possui um conjunto ortonormal completo de autofunções $\{\xi_j\}_{j=1}^\infty$, de modo que $S''_{\bar{\phi}}\xi_j = \mu_j\xi_j$ para autovalores μ_j, tomamos o espaço de funções da forma

$$\phi^{(n)} = \bar{\phi} + \sum_{j=1}^{n} a_j\xi_j,$$

com $a_j \in \mathbb{R}$, como a aproximação n-dimensional do espaço de caminhos $P_{x,y,t}$.

Expandindo $S\left(\phi^{(n)}\right)$ em torno de $\bar{\phi}$ obtemos

$$\begin{aligned} S\left(\phi^{(n)}\right) &= S\left(\bar{\phi}\right) + S'_{\bar{\phi}}\left(\xi\right) + \frac{1}{2}\left\langle \xi, S''_{\bar{\phi}}\xi \right\rangle + O\left(\|\xi\|^3\right) = \\ &= S\left(\bar{\phi}\right) + \frac{1}{2}\left\langle \xi, S''_{\bar{\phi}}\xi \right\rangle + O\left(\|\xi\|^3\right), \end{aligned}$$

onde $\xi = \phi^{(n)} - \bar{\phi} = \sum_{j=1}^n a_j\xi_j$, e portanto

$$S\left(\phi^{(n)}\right) = S\left(\bar{\phi}\right) + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n} \mu_j a_j^2 + O\left(\|\xi\|^3\right).$$

Assim obtemos,

$$\exp\left[\frac{i}{h}S\left(\phi^{(n)}\right)\right] = \exp\left[\frac{i}{h}\left(S\left(\bar{\phi}\right) + \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{n}\mu_j a_j^2 + O\left(\|\xi\|^3\right)\right)\right] =$$
$$= \exp\left[iS\left(\bar{\phi}\right)/h\right]\exp\left[\frac{i}{2h}\sum \mu_j a_j^2\right]\exp\left[O\left(\|\xi\|^3/h\right)\right] =$$
$$= e^{iS\left(\bar{\phi}\right)/h} e^{i\sum \mu_j a_j^2/2h}\left(1 + O\left(\|\xi\|^3/h\right)\right),$$

e como temos também

$$D\phi^{(n)} = C_n \prod_{j=1}^{n} da_j,$$

para alguma constante C_n, utilizamos a formulação de Feynman para escrever (de maneira mais ou menos informal)

$$e^{-i\mathbf{H}t/h}(x,y) = \int_{P_{x,y,t}} e^{iS(\phi)/h}D\phi = \lim_{n\to\infty}\int_{P^{n+1}_{x,y,t}} e^{iS\left(\phi^{(n)}\right)/h}D\phi^{(n)} =$$
$$= \lim_{n\to\infty}\int_{\mathbb{R}}\cdots\int_{\mathbb{R}} e^{iS\left(\bar{\phi}\right)/h}e^{i\sum\mu_j a_j^2/2h}\left(1 + O\left(\frac{\|\xi\|^3}{h}\right)\right)C_n\prod_{j=1}^{n}da_j =$$
$$= \lim_{n\to\infty}\int_{\mathbb{R}^n} e^{iS\left(\bar{\phi}\right)/h}e^{i\sum\mu_j a_j^2 2h}\left(1 + O\left(\frac{a^3}{h}\right)\right)C_n d^n a,$$

onde $a = (a_1, ..., a_n) \in \mathbb{R}^n$. Fazendo $b_j = a_j/\sqrt{h}$ ficamos com

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{i\sum\mu_j a_j^2/2h}\left(1 + O\left(\frac{a^3}{h}\right)\right)d^n a =$$
$$= \int_{\mathbb{R}^n} e^{i\sum\mu_j b_j^2/2}\left(1 + O\left(b^3\sqrt{h}\right)\right)h^{n/2}d^n b$$

e portanto

$$e^{-i\mathbf{H}t/h}(x,y) = \lim_{n\to\infty}\int_{\mathbb{R}^n} e^{iS\left(\bar{\phi}\right)/h}e^{i\sum\mu_j b_j^2/2}\left(1 + O\left(b^3\sqrt{h}\right)\right)C_n h^{n/2}d^n b =$$
$$= \lim_{n\to\infty} C_n\left(2\pi ih\right)^{n/2}\left(det\left(S''_{\bar{\phi}}|_{F_n}\right)\right)^{-1/2}e^{iS\left(\bar{\phi}\right)/h}\left(1 + O\left(\sqrt{h}\right)\right),$$

onde $F_n = \left\{\sum_{j=1}^{n} a_j\xi_j\right\}$ de modo que $det\left(S''_{\bar{\phi}}|_{F_n}\right) = \prod_{j=1}^{n}\mu_j$.

No caso da particula livre temos o propagador dado explicitamente por

$$e^{-i\mathbf{H}_0 t/h}(x,y) = \left(2\pi iht/m\right)^{d/2}e^{im|x-y|^2/2ht},$$

donde

$$e^{-i\mathbf{H}_0 t/h}(x,x) = (2\pi iht/m)^{d/2} .$$

Por outro lado temos, pelo que fizemos anteriormente,

$$e^{-i\mathbf{H}_0 t/h}(x,x) = \lim_{n\to\infty} C_n \,(2\pi ih)^{n/2} \left(det\hat{S}''_{\phi_0}\right)^{-1/2} .$$

Podemos utilizar tal resultado para evitar a determinação das constantes C_n que aparecem na "medida" $D\phi^{(n)}$ tomando a razão

$$\frac{e^{-i\mathbf{H}t/h}(x,y)}{(2\pi iht/m)^{d/2}} = \frac{e^{-i\mathbf{H}t/h}(x,y)}{e^{-i\mathbf{H}_0 t/h}(x,x)} =$$

$$= \frac{\lim_{n\to\infty} C_n \,(2\pi ih)^{n/2} \left(detS''_{\bar\phi}\right)^{-1/2} e^{iS(\bar\phi)/h} \left(1+O\left(\sqrt{h}\right)\right)}{\lim_{n\to\infty} C_n \,(2\pi ih)^{n/2} \left(det\hat{S}''_{\phi_0}\right)^{-1/2}} =$$

$$= \lim_{n\to\infty} \frac{\left(detS''_{\bar\phi}\right)^{-1/2}}{\left(det\hat{S}''_{\phi_0}\right)^{-1/2}} e^{iS(\bar\phi)/h} \left(1+O\left(\sqrt{h}\right)\right) =$$

$$= \left(\frac{det\hat{S}''_{\phi_0}}{detS''_{\bar\phi}}\right)^{1/2} e^{iS(\bar\phi)/h} \left(1+O\left(\sqrt{h}\right)\right),$$

assim, obtemos, como queriamos,

$$e^{-i\mathbf{H}t/h}(x,y) = \left(\frac{2\pi ith}{m}\right)^{-d/2} \left(\frac{det\hat{S}''_{\phi_0}}{detS''_{\bar\phi}}\right)^{1/2} e^{iS(\bar\phi)/h} \left(1+O\left(\sqrt{h}\right)\right).$$

Observamos que, por outro lado, ometodo de Laplace analisa o limite assintótico de integrais da forma $\int f(x)e^{S(x)/h}dx$, $S:\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, quando $\hbar \to 0$ (ver [251]). Este procedimento é diferente do método da fase estacionária.

Existe na verdade uma relação entre os dois procedimentos (método da fase estacionária e metodo de Laplace) que no fundo significa fazer uma "Wick rotation", i.e., trocar o tempo t por "it". Desta forma a exponencial complexa vira uma exponencial real e vice-versa. É possível mostrar que as funções de correlação do caso complexo são de fato a continuação analítica das funções de correlação do caso real (a referencia inicial do assunto é [271] [272])).

2.15 Segunda variação e campos de Jacobi

No estudo da integral de caminhos de Feymann, nos deparamos com o problema de identificar um caminho que minimiza a ação clássica

$$S(\phi) := \int_0^T \frac{m}{2}|\dot{\phi}|^2 - V(\phi)dt. \tag{2.77}$$

Para tanto, vimos que é necessário conhecer os pontos críticos da ação e posteriormente descobrir se eles são de fato mínimos, analisando para tanto se a forma quadrática $S''(\phi)$ (o operador Hessiano) é positiva-definida. Outra questão importante é identificar a quantidade de caminhos minimizantes ligando dois pontos x e y. A existência de um único caminho minimizante pode ser favorável para aplicar o método da fase estacionária e então calcular limites semiclássicos. A seguir, faremos um breve estudo de algumas ferramentas que podem ser úteis para determinar a unicidade de caminho minimizante para (2.77).

Para maiores detalhes sobre os tópicos da presente seção referimos o leitor a [156].

Nas referencias [307] e [98] vários exemplos interessantes sobre o tópico em análise são desenvolvidos. O trabalho [294] apresenta resultados assintóticos relativos à equação de Schrödinger em variedades com curvatura negativa.

De agora em diante, denotamos por ψ um caminho crítico para a ação (2.77).

Proposição 2.37. *Se V'' é limitada, então existe $T_0 > 0$ suficientemente pequeno tal que $S''(\psi) > 0$ em $[0, T_0]$.*

Demonstração. Temos a seguinte a igualdade de operadores lineares no espaço dos caminhos $L^2[0, t]$ que se anulam nos extremos (ver Exemplo 5 seção 2.13):

$$S''(\psi) = -m\frac{d^2}{ds^2} - V''(\psi).$$

Note que como o espectro de $-d^2/ds^2$ é constituído por autovalores isolados que tendem a infinito, sendo o primeiro deles π^2/T^2, tem-se que

$$\langle S''(\psi)\xi, \xi\rangle \geq \left[\left(m\,\frac{\pi}{T}\right)^2 - \sup|V''|\right] \|\xi\|^2.$$

Assim, basta escolher T_0 suficientemente pequeno para que o termo entre colchetes fique positivo.

□

Como uma consequência da Proposição anterior, segue que para tempo pequeno, um caminho crítico é sempre minimizante da ação.

Vamos falar agora de **Campos de Jacobi** e pontos conjugados. Referimos o leitor ao Cap 1 seção 10 de [90] para mais detalhes sobre o material abaixo apresentado.

A seguir, vamos analisar os fenômenos que podem acontecer para um caminho crítico que por ventura não é mais mínimo. Isso pode ser feito através do estudo de campos de Jacobi, como segue.

Para começar, vejamos como se dá o afastamento de caminhos críticos.

Lembramos que agora consideramos curvas $\phi(t)$, definidas em $[0,T]$, tais que $\phi(0)=x$, mas $\phi(T)$ é livre. Neste caso, $\partial S(\phi)$ é um funcional definido no espaço das curvas $\epsilon(t)$ tais que $\epsilon(0)=0$. Uma deformação do caminho $\psi(t)$ é uma família $\phi_s(t)$ de caminhos tal que $\phi_s(0)=x$, para todo t. Pela definição de $\partial^2 S$, temos que

$$\frac{\partial}{\partial s}\,(\,\partial S\,(\phi_s)\,(\frac{\partial \phi_s}{\partial s})\,) = \partial^2\,S(\phi_s)\,(\frac{\partial \phi_s}{\partial s}\,).$$

Observe que $\frac{\partial \phi_s}{\partial s}(0)=0$ para todo s.

Se $\psi(t)$ é um caminho crítico para S, $\dot{\psi}(0)=v$, $w\in\mathbb{R}^d$, e ainda $v(s)$ é uma curva em $\mathbb{R}^d$ tal que $v(0)=v$, $v'(0)=w$, então existe um deformação $\phi_s(t)$ de $\psi(t)$ tal que $\frac{\partial}{\partial t}\,\phi_s(t)\,|_{t=0}=v(s)$, porque a equação dos caminhos críticos é de segunda ordem (vide 2.13 Exemplo 5). Como $\partial_s\,(\phi_s)=0$, temos que

$$\partial^2 S\;(\phi_s)\,(\,\frac{\partial \phi_s}{\partial s}\,)=0.$$

Definimos o campo de Jacobi $J_w(t)$ por $J_w(t)=\frac{\partial \phi_s\,(t)}{\partial s}\,|_{s=0}$, e obtemos que

$$\partial^2 S\;\;(\psi(t))(J_w\,(t))=0.$$

Observe que $J_w(0)=0$ e que

$$J_w'(0)=\frac{d}{dt}\,(\frac{\partial \phi_s\,(t)}{\partial s}|_{s=0}\,)_{t=0}\;=$$

$$\frac{\partial^2 \phi_s\,(t)}{\partial s\,\partial t}|_{s=0,t=0}\;=\frac{d}{ds}\,(\frac{\partial \phi_s\,(t)}{\partial t}|_{t=0}\,)_{s=0}\;=\,v'(0)=\,w.$$

Em resumo, seja $x \in \mathbb{R}^d$ e ψ um caminho crítico com $\psi(0) = x$ e $v := \dot{\psi}(0)$. Seja $w \in \mathbb{R}^d$ e considere $v(s)$ uma curva em $\mathbb{R}^d$ tal que $v(0) = v$ e $v'(0) = w$. Então para determinar o quanto os caminhos se afastam de ψ "na direção w", consideramos a derivada

$$J_w(t) := \left. \frac{\partial \phi_s(t)}{\partial s} \right|_{s=0}. \tag{2.78}$$

Como vimos acima:

$$0 = \frac{\partial}{\partial s}\left(\partial S(\phi_s)\right) = \partial^2 S(\phi_s) \frac{\partial \phi_s}{\partial s},$$

e portanto, aplicando para $s = 0$, obtemos que, ao longo de ψ, J_w satisfaz a *equação de Jacobi*

$$S''(\psi)(t) J_w(t) = 0. \tag{2.79}$$

Além disso, J_w satisfaz as condições iniciais $J_w(0) = 0$ e $J'_w(0) = w$.

Definimos anteriormente pontos conjugados a x como sendo aqueles $\psi(\tau)$ tais que $S''(\psi \,|\, [0, \tau]\,)$ tem algum autovalor nulo. Vejamos que esta definição pode ser substituída por outra envolvendo campos de Jacobi:

Proposição 2.38. *$\psi(\tau)$ é ponto conjugado a $\psi(0)$ se e somente se existe w tal que $J_w(\tau) = 0$.*

Demonstração. Para tal, note que se $\xi(t)$ satisfaz $S''(\psi)\xi = 0$, então existe w tal que $J_w(t) = \xi(t)$. De fato, seja $w := \xi'(0)$. Então J_w e ξ satisfazem a mesma EDO com mesmas condições iniciais, donde segue que devem coincidir. Isto conclui a demonstração.

□

A partir de agora, denotamos por $J(t)$ a transformação linear dada por $J(t)(w) = J_w(t)$.

Vamos analisar agora mais detidamente a ação de um caminho crítico. Dados x, y pontos de $\mathbb{R}^d$, definimos a *ação de x a y em tempo T* por

$$S_0(x, y, T) := S(\psi) = \int_0^T \frac{m}{2}|\dot{\psi}|^2 - V(\psi) dt \tag{2.80}$$

onde $\psi \in C^1([0, T], \mathbb{R}^d)$ é um caminho crítico para S ligando x a y.

Este valor depende da escolha do caminho crítico.

Agora, para cada s, seja ψ_s o caminho crítico que começa em $x+sw$ e termina em y no tempo T, onde $w \in \mathbb{R}^d$ está fixo. Assim, temos que a derivada de S_0 com relação a x é o funcional linear dado por

$$\frac{\partial S_0}{\partial x}(w) = \frac{d}{ds} S_0(x, \psi_s(T), T)\bigg|_{s=0} = \frac{d}{ds} S(\psi_s)\bigg|_{s=0}, \tag{2.81}$$

e portanto temos que

$$\frac{\partial S_0}{\partial x}(w) = \int_0^T m\dot{\psi}_s \cdot \frac{\partial \dot{\psi}_s}{\partial s} - \nabla V(\psi_s) \cdot \frac{\partial \psi_s}{\partial s} dt\bigg|_{s=0},$$

e agora basta usar integração por partes para obter que

$$\frac{\partial S_0}{\partial x}(w) = \left[\int_0^T \Big(m\ddot{\psi}_s - \nabla V(\psi_s)\Big) \cdot \frac{\partial \psi_s}{\partial s} dt + m\dot{\psi}_s \cdot \frac{\partial \psi_s}{\partial s}\bigg|_0^T\right]_{s=0}.$$

Como ψ_s é caminho crítico para todo s, o termo entre parênteses na integral se anula sempre. Assim,

$$\frac{\partial S_0}{\partial x}(w) = m\, \dot{\psi}(T) \cdot \frac{\partial \psi_s(T)}{\partial s}\bigg|_{s=0} - m\, \dot{\psi}(0) \cdot \frac{\partial \psi_s(0)}{\partial s}\bigg|_{s=0}.$$

e como $\partial \psi_s(0)/\partial s = w$ e $\partial \psi_s(T)/\partial s = 0$, segue que

$$\frac{\partial S_0}{\partial x}(w) = -m\dot{\psi}(0) \cdot w,$$

ou, pelo mesmo abuso de notação de sempre,

$$\frac{\partial S_0}{\partial x} = -m\dot{\psi}(0). \tag{2.82}$$

Por outro lado, observamos que $\partial \dot{\psi}(0)/\partial y$ pode ser calculado, ao menos formalmente, da seguinte forma: considere $y + sw$, w fixo, extremos finais dos caminhos críticos φ_s que ligam x a $y + sw$ em tempo T. Ora, pelo que fizemos antes, ao definir campos de Jacobi, temos que

$$J(T)\,(\,\frac{d\dot{\varphi}_s\,(0)}{ds}\,|_{s=0}\,) = \frac{d\varphi_s\,(T)}{ds}\,|_{s=0} \,=\, w,$$

“quantum2
2019/12/13
page 351

assim
$$\frac{\partial \dot{\psi}(0)}{\partial y}(w) = \left.\frac{d\dot{\varphi}_s\,(0)}{ds}\right|_{s=0} = J(T)^{-1}(w).$$

Ou seja,
$$\frac{\partial \dot{\psi}(0)}{\partial y} = J(T)^{-1} \tag{2.83}$$

Juntando as informações acima, obtemos
$$\frac{\partial^2 S_0(x,y,T)}{\partial y \partial x} = -mJ(T)^{-1} \tag{2.84}$$

que nos dá o seguinte resultado:

Proposição 2.39. *Se y é ponto conjugado a x, então*
$$\det\left(\frac{\partial^2 S_0(x,y,T)}{\partial y \partial x}\right) = \pm\infty.$$

É interessante comparar este resultado com o teorema de Van Vleck na seção 1.11.

Exemplo 2.11. Como exemplo de aplicação, considere $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$. Neste caso, tem-se que
$$S_0(x,y,T) = \frac{\omega}{2\,\mathrm{sen}(\omega T)}\left[\left(x^2+y^2\right)\cos(\omega T) - 2xy\right],$$

donde é fácil obter que
$$\frac{\partial^2 S_0(x,y,T)}{\partial y \partial x} = -\frac{\omega}{\mathrm{sen}\,\omega T}.$$

Desta forma, segue que os pontos $\phi(n\pi/\omega)$ são conjugados a $\phi(0)$ para qualquer inteiro n.

Em Geometria Riemanniana também se estuda os campos de Jacobi e os pontos conjugados (ver [58]). Isto corresponde ao caso em que $V = 0$.

O Teorema do índice é um resultado muito importante neste contexto (ver [59])

Uma pergunta natural a se fazer é se existe alguma métrica Riemanianna onde os campos de Jacobi definidos acima (com potencial $V \neq 0$)

são de fato os campos de Jacobi definidos na estrutura desta Geometria Riemanniana. Esta questão é similar ao descrito pelo Princípio de Maupertius (ver Teorema 2.6.1 em [228]). Vamos elaborar sobre isto.

A equação de Jacobi $S''(\phi)J = 0$ é aqui dada por

$$mJ''(t) + D^2 V_{\psi(t)} J(t) = 0$$

e portanto é de se esperar que a derivada segunda do potencial faça o papel da curvatura ao longo da trajetória. Observe também que no caso particular em que o potencial é nulo, as trajetórias são retas (e portanto geodésicas de $\mathbb{R}^d$) e a equação de Jacobi também é a mesma que aquela em $\mathbb{R}^d$.

Vejamos a seguir como os caminhos críticos (isto é, as trajetórias clássicas) se relacionam com as geodésicas da Geometria Riemanniana. Para isso, dado um caminho ϕ, defina a energia por

$$E(t) := \frac{m}{2}|\dot{\phi}(t)|^2 + V(\phi(t)).$$

É imediato verificar que a energia ao longo de um caminho crítico é constante.

Teorema 2.40. *A trajetórica clássica de uma partícula com energia E é uma geodésica na métrica Riemanniana*

$$\langle u, v\rangle_x := 2(E - V(x))u \cdot v$$

no conjunto $\{x \in \mathbb{R}^d | V(x) \leq E\}$ (a região clássica permitida), onde $u \cdot v$ é o produto interno usual de $\mathbb{R}^d$.

Para a prova deste teorema, veja o fim do capítulo 2 de [228].

2.16 Quantização de Weyl, estados coerentes e microsuporte

O Hamiltoniano está definido para (q,p) (ou, (x,p)) no espaço de fase. Por sua vez, os estados da Mecânica Quântica estão definidos para q (ou x) no espaço de configuração, ou então, via Transformada de Fourier, apenas para p no espaço dos momentos. Desejamos explorar diversas formas que expressem as probabilidades oriundas da Mecânica Quântica mas desta vez, alternativamente, no espaço de fase (x,p); em particular, a medida de Wigner desempenha um papel muito importante na teoria. Antes vamos tratar da quantização de Weyl e da decomposição em estados coerentes.

Referimos o leitor para [69], [87], [321], Lecture 13 em [94], chapter 7 in [333] ou chapter 3 em [90] para um estudo mais completo do assunto.

Decomposição em estados coerentes

Seja $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) = \mathcal{L}^2(dq)$ um espaço de Hilbert, seja Ω um espaço métrico e Σ a sigma-algebra de Borel de Ω (em alguns casos Ω é o espaço cotangente de uma variedade). Considere uma medida m em (Ω,Σ) (conforme [122]). Vamos denotar por a um ponto genérico em Ω.

Assim, dado $f:\Omega\to\mathbb{R}$, podemos considerar a integral $\int f(a)dm(a)$.

O colocado acima faz sentido neste setting geral de espaço métrico, mas aqui vamos considerar $\Omega = \mathbb{R}^2$. Neste caso m será a medida de Lebesgue dx.

Fixada a medida m e a família de operadores $B(a):\mathcal{L}^2(\mathbb{R})\to\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, o sentido da integral $\int B(a)\,dm(a) = C$ é o seguinte: para qualquer função $f,g\in\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, temos que $< f, C(g) >= \int < f, B(a)(g) > dm(a)$. Note que a última integral é um conceito já bem conhecido, ou seja, a integral de uma função tomando valores em $\mathbb{C}$.

Referimos o leitor interessado em mais detalhes para [165] onde é desenvolvida a teoria da integração de funções que tomam valores em operadores limitados.

Seja $\{P_a\}_{a\in\Omega}$ uma familia de operadores limitados (indexada por a) de projeções finito-dimensionais em $\mathcal{H}$ tal que

(i) a função $a\to P_a$ é continua, e

(ii) $\int_\Omega P_a dm(a) = I$ (ver expressões (1.2.7) e (1.2.11) na seção 1.2 em [283]) .

Chamamos de P_a, $a\in\Omega$, uma família de estados coerentes.

Tipicamente, $\Omega = \mathbb{R}^2$ é o espaço de fase do sistema Hamiltoniano clássico. Desejamos associar a cada ponto do espaço de fase $a = (q, p)$ um vetor $\eta_a \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) = \mathcal{H}$ e, finalmente, o correspondente projetor $P_a(.) = |\eta_a >< \eta_a| \,.\, >$.

A expressão $\int_\Omega P_a dm(a) = I$ descreve de certa forma uma resolução da identidade (algo desta natureza, embora não exatamente o que consideramos aqui, aparece na seção 2.3) em que os pontos do espaço de fase são associados a operadores. Os vetores η_a não são necessariamente linearmente independentes.

Uma outra posivel definição (ver [209]): dada uma medida m em um conjunto S considere uma função $\Phi : S \to \mathcal{H}$, onde $\mathcal{H}$ é um espaço de Hilbert com produto interno $< .,. >$, de tal forma que $\Phi(s)$ tem sempre norma um. A família $\Phi(s)$, $s \in S$, é dita de estados coerentes se

$$\int < \phi_1, \Phi(s) >< \Phi(s), \phi_2 > \; dm(s) \; =< \phi_1, \phi_2 >$$

para todo $\phi_1, \phi_2 \in \mathcal{H}$.

A quantização de Weyl

Vamos considerar aqui apenas o exemplo descrito acima em que $\Omega = \mathbb{R} \times \mathbb{R}$, com coordenadas $a = (q, p) = (a_1, a_2)$. As principais referencias no assunto são [208] [295], [283], [85], [84], [127] and [199].

Para cada (a_1, a_2) considere o operator

$$U(a_1, a_2) = \, exp\,(-\frac{i}{h}\,(\,a_1\,\mathcal{P}\,-\,a_2\,\mathcal{X}\,)\,) : \mathcal{H} \to \mathcal{H}.$$

Usando coordenadas (x, p) ele se expressa como

$$e^{-\,\frac{i}{h}\,(\,x\,\mathcal{P}\,-\,p\,\mathcal{X}\,)}.$$

A quantização de Weyl, como veremos, se baseia na utilização desta familia de operadores indexada por (x, p).

Note que se ψ for o pacote de ondas Gaussiano como momento a e posição b, então $e^{-\,\frac{i}{h}\,(\,x\,\mathcal{P}\,-\,p\,\mathcal{X}\,)}\,(\psi)$ é o pacote Gaussiano com momento $a + p$ e posição $b + q$.

A construção da família de estados coerentes será feita a partir de um certo elemento fixo $\phi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, com norma igual a 1. Desejamos associar pontos (x, p) (de uma forma natural) a operadores.

Seja um ϕ fixado. Então, para cada $y \in \mathbb{R}$, se pode mostrar que

$$[U((a_1,a_2))\,\phi]\,(y) = exp(-\,\frac{i}{2\,\hbar}\,a_1\,a_2\,)\;exp(\,\frac{i}{\hbar}\,a_2\,y\,)\;\phi(y-a_1).$$

Vamos denotar $\phi_{a_1,a_2} = [U((a_1,a_2))\,\phi] \in \mathcal{H}$.

Note que se supormos que

$$<\phi, \mathcal{P}\,\phi>= 0,$$

e

$$<\phi, \mathcal{X}\,\phi>= 0,$$

então

$$<\phi_{a_1,a_2}, \mathcal{P}\,\phi_{a_1,a_2}>= a_2,$$

De fato,

$$\mathcal{P}\phi_{a_1,a_2}(y) = -i\hbar\phi'_{a_1,a_2}(y) =$$

$$-i\hbar\cdot exp\left(\frac{-i}{2\hbar}a_1a_2\right)\left[\frac{i}{\hbar}a_2 exp\left(\frac{i}{\hbar}a_2y\right)\phi(y-a_1) + exp\left(\frac{i}{\hbar}a_2y\right)\phi'(y-a_1)\right]$$

Substituindo no produto interno e usando o fato que

$$0 =<\phi, \mathcal{P}\phi>= \int \phi(y)\overline{i\hbar\phi'(y)}dy,$$

obtemos (note que $|\phi| = 1$)

$$<\phi_{a_1,a_2}, \mathcal{P}\,\phi_{a_1,a_2}>=$$

$$\int exp\left(\frac{-i}{2\hbar}a_1a_2\right)exp\left(\frac{i}{\hbar}a_2y\right)\phi(y-a_1)\overline{\left[-i\hbar\cdot exp\left(\frac{-i}{2\hbar}a_1a_2\right)\frac{i}{\hbar}a_2 exp\left(\frac{i}{\hbar}a_2y\right)\phi(y-a_1)\right]}dy$$

$$= \int a_2\phi(y-a_1)\overline{\phi(y-a_1)}dy = a_2$$

Além disso $<\phi_{a_1,a_2}, \mathcal{X}\phi_{a_1,a_2}>= a_1$, como se pode ver usando o fato que

$$0 =<\phi, \mathcal{X}\phi>= \int \phi(y)\overline{y\phi(y)}dy,$$

e calculando

$$<\phi_{a_1,a_2}, \mathcal{X}\phi_{a_1,a_2}>=$$

$$\int exp\left(\frac{-i}{2\hbar}a_1a_2\right)exp\left(\frac{i}{\hbar}a_2y\right)\phi(y-a_1)\overline{y\cdot exp\left(\frac{-i}{2\hbar}a_1a_2\right)exp\left(\frac{i}{\hbar}a_2y\right)\phi(y-a_1)}dy$$

$$= \int y\phi(y-a_1)\overline{\phi(y-a_1)}dy$$

Fazendo $x = y - a_1$, $dy = dx$ vemos que esta integral vale

$$\int x\phi(x)\overline{\phi(x)}dx + \int a_1\phi(x)\overline{\phi(x)}dx = a_1.$$

Vamos considerar um exemplo particularmente importante e útil de ϕ (que será muitas vezes usado nas próximas seções).

Vamos tomar como ϕ a distribuição Gaussiana de média zero e variância $\hbar$:

$$\phi(\cdot) = \left(\frac{1}{\pi\,\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{|\,.\,|^2}{2\,\hbar}} \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}\,) = \mathcal{H},$$

e assim tome

$$\eta_{(a_1,a_2)} = \eta_a \;=\; U(a)\,\phi\,\in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}\,) = \mathcal{H}.$$

Note que não necessariamente vale $|\eta_{(a_1,a_2)}|_2 = 1$.

Mais explicitamente,

$$\eta_{(a_1,a_2)}(q) = \eta_{\hbar,(a_1,a_2)}(q) =$$

$$\left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{1/4} exp\,\left(\frac{-i}{2\hbar}\,a_1\,a_2\right)\;exp\,\left(\frac{i}{\hbar}\,q\,a_2\right)exp\,\left(-\,\frac{(q-a_1)^2}{2\hbar}\right).$$

Com esta escolha temos que a variância $\Delta_{\eta(a_1,a_2)}\mathcal{P}$ e $\Delta_{\eta(a_1,a_2)}\mathcal{X}$, respectivamente, dos operadores $\mathcal{P}$ e $\mathcal{X}$, , são todas as mesmas, onde

$$\Delta_\phi(A) = [<\phi, A^2\,\phi> - <\phi, A\,\phi>^2\,]^{1/2} = E_\phi[\,(A - E_\phi(A)\,I\,)^2\,]^{1/2}.$$

Pode se mostrar que

$$\iint |\eta_{a_1,a_2} >< \eta_{a_1,a_2}|\frac{da_1da_2}{2\pi\hbar} = Id$$

no sentido de que para toda função ψ temos

$$\iint \overline{\eta_{a_1,a_2}(q)} < \eta_{a_1,a_2}|\psi > \frac{da_1da_2}{2\pi\hbar} = \overline{\psi(q)}$$

De fato, calculando a integral da esquerda obtemos

$$\iint \overline{\eta_{a_1,a_2}(q)} \int \eta_{a_1,a_2}(y)\overline{\psi(y)}dy\frac{da_1da_2}{2\pi\hbar}$$

$$= \iiint exp\left(\frac{i}{2\hbar}a_1a_2\right) exp\left(\frac{-i}{\hbar}a_2q\right)\left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} exp\left(\frac{-(q-a_1)^2}{2\hbar}\right) exp\left(\frac{-i}{2\hbar}a_1a_2\right) exp\left(\frac{i}{\hbar}a_2y\right)$$
$$\left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} exp\left(\frac{-(y-a_1)^2}{2\hbar}\right)\overline{\psi(y)}\frac{dyda_1da_2}{2\pi\hbar}$$

Chamando $f(y) = exp\left(\frac{-(y-a_1)^2}{2\hbar}\right)\overline{\psi(y)}$, temos a seguinte expressão para a transformada de Fourier inversa:

$$\check{f}(a_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int exp\left(\frac{i}{\hbar}a_2y\right)f(y)dy.$$

Substituindo na expressão acima, obtemos

$$\left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\iint exp\left(\frac{-i}{\hbar}a_2q\right) exp\left(\frac{-(q-a_1)^2}{2\hbar}\right)\check{f}(a_2)\frac{da_2da_1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Calculando a transformada de Fourier de $\check{f}$ em q encontramos

$$f(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int exp\left(\frac{-i}{\hbar}a_2q\right)\check{f}(a_2)da_2.$$

Substituindo,

$$\left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int f(q)exp\left(\frac{-(q-a_1)^2}{2\hbar}\right)da_1$$

$$= \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\int exp\left(\frac{-(q-a_1)^2}{\hbar}\right)\overline{\psi(q)}da_1$$

Fazendo $\frac{a_1-q}{\sqrt{\hbar}} = x$, $da_1 = \sqrt{\hbar}dx$ obtemos

$$\left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\overline{\psi(q)}\int e^{-x^2}\sqrt{\hbar}dx = \overline{\psi(q)}$$

Desta forma, $\eta_{(a_1,a_2)}$, $(a_1,a_2)\in\mathbb{R}^2$, define uma família de estados coerentes.

Exemplo 2.12. Estados coerentes para o oscilador harmonico.

Aqui tomamos $\Omega = \mathbb{C} = \mathbb{R}^2$.

Considere $\psi_n : \mathbb{R}\to\mathbb{C}$, $n\in\mathbb{N}$ um conjunto ortonormal completo de autofunções obtido da quantização do oscilador harmônico (ver seção 1.2).

Para cada valor $s=(q+i\,p)\in\mathbb{C}$ (onde q é a posição e p o momento) considere o vetor

$$C(s)=e^{\frac{-m\,w\,s^2}{h}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{s^n}{n!}\,\psi_n.$$

Isto define uma família de estados coerentes.

Seja $\phi_{q,p}$ uma família de estados coerentes. A partir do formalismo acima, podemos associar de maneira natural uma dada $\psi\in\mathcal{L}^2(dq)$, $q\to\psi(q)$, a um certo ρ_ψ onde $\rho_\psi(q,p)\geq 0$ satisfaz $\int_{\mathbb{R}^2}\rho_\psi(q,p)=1$. Obtemos assim uma medida no espaço de fase a partir de um estado no espaço de configuração. Esta associação no entanto não é totalmente satisfatória (embora utilizada muitas vezes em diversos problemas).

Vamos considerar uma variação do nosso procedimento. Denote

$$\rho_\psi(q,p)\,=\frac{1}{2\pi h}\,|<\psi_{q,p},\psi>|^2.$$

Chamamos ρ_ψ a função de Husimi associada a ψ (ver [199] ou Cap 3 seção 11 em [90]).

Como exemplo considere o caso do oscilador harmônico $H(q,p)=\frac{1}{2}\,(q^2+p^2)$.

Lembre que o ground state é $\Omega_0(q)=c\,(\frac{1}{\pi h})^{1/4}\,e^{-\frac{q^2}{2\,h}}$.

A $m-$th autofunção é

$$\Omega_m(q)=(\frac{1}{2^m\,m!})^{1/2}\,P_m(q/\sqrt{h})\Omega_0(q),$$

onde P_m é o m-th polinomio de Hermite. O $m-$th autovalor é $\lambda_m=h\,(m+1/2)$.

Neste caso, a distribuição de Husimi associada a Ω_m é

$$\rho_{\,\Omega_m}(q,p)=\frac{1}{2\pi h\,m!}\,(\frac{p^2+q^2}{2\,h})^m\;e^{-\frac{p^2+q^2}{2\,h}}$$

Se considerarmos um valor de energia fixa $E>0$, e E_m um valor próximo, então tomando $E_m=(1/2+m)h$, com $h=E/m$, resulta que quando $m\to\infty$, temos que a função de Husimi vai concentrar no conjunto dos pontos (q,p) que possuem energia clássica $H(q,p)$ igual ao valor E [199]. Acima, para cada valor de massa m tomamos o valor mais próximo do fixado E.

Neste sentido embora não totalmente satisfatória a distribuição de Husimi (via esta associação) se torna a clássica no limite semiclássico $h \to 0$. Observamos que o limite semi-clássico pode ter varios e diferentes sentidos dependendo do problema (e da necessidade do formalismo).

Considere o assim chamado limite semi-classico $h \to 0$. Este $\rho_{h,\psi} = \rho_\psi$ não é, em geral, a probabilidade de encontrar (q,p) (que esta definido no espaço de fase). Mas, se assumirmos que, ϕ é da forma do η então, num certo sentido isto é verdadeiro.

Um formalismo mais satisfatório e elegante será descrito a seguir.

A densidade $|\psi(x)|^2$ que obtemos do estado ψ (que descreve posição) está definida no espaço de configuração x. Alternativamente, podemos considerar via transformda de Fourier, o estado $\hat{\psi}$ (que descreve momento), que tem densidade $|\hat{\psi}(p)|^2$, e que, por sua vez, está definida no espaço dos momentos p. Gostaríamos de obter alguma espécie de densidade conjunta (das duas variáveis) definida no espaço de fase (x,p) e que descrevesse ao mesmo tempo posição e momento. Note que na Mecânica Hamiltoniana Clássica este é o ponto de vista natural. A medida de Wigner $W(x,p)$ vai desempenhar tal papel. Uma referencia bastante completa sobre este assunto é o texto [349].

Uma descrição das medidas de Wigner quando o espaço de estados tem dimensão finita aparece em [27]. A referencia [144] relaciona medidas de Wigner com medidas de Aubry-Mather.

Considere $\tilde{f}(a_1,a_2)$, $\tilde{f} : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, que se denomina de transformada de Fourier simplética de $f(q,p)$, $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, que é descrita como

$$\tilde{f}(a_1,a_2) = \int_{\mathbb{R}^2} f(q,p)\, e^{\frac{i}{h}\,(a_1\,p\,-\,a_2\,q)}\ \frac{dq\,dp}{2\,\pi\,h}.$$

Ressaltamos a notação aqui utilizada, onde usamos o tilda (acima) para a transformada de Fourier simplética, e guardamos o chapéu (acima) para a expressão que envolve a transformada de Fourier usual, isto é,

$$\hat{f}(a_1,a_2) = \int_{\mathbb{R}^2} f(q,p)\, e^{\frac{i}{h}\,(a_1\,p\,+\,a_2\,q)}\ \frac{dq\,dp}{2\,\pi\,h}.$$

A transformada de Fourier simpletica é algumas vezes denominada de "twisted"Fourier transform. Lembre que a 2-forma simpletica w natural na Mecânica Clássica (quando $(q,p) \in \mathbb{R}^2$, por exemplo) é tal que $w(\,(p,q),(a_2,a_1)\,) = p\,a_1 - q\,a_2$. Em alguns domínios da Mecânica

Quântica é mais natural tratar da transformada de Fourier simpletica do que transformada de Fourier usual (ver [127]).

A transformada de Fourier simpletica inversa é dada por

$$\tilde{f}^{-1}(q,p) = \int_{\mathbb{R}^2} f(a_1,a_2)\, e^{-\frac{i}{h}(a_1\,p - a_2\,q)}\ \frac{da_1\,da_2}{2\,\pi\,h}.$$

Vale neste caso algo que ocorre de forma similar para a transformada de Fourier usual. Para toda f vale o seguinte: aplicar a transformada de Fourier simpletica inversa na transformada de Fourier simpletica de f resulta na propria f.

É natural considerar que estas operações agem no espaço das distribuições $\mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ (conforme seção 1.14). Note que $f \to \tilde{f}$ é um operador unitário em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^2)$ (ver [85]).

Lembre que

$$U(a_1,a_2) = \,exp\,(-\,\frac{i}{h}\,(\,a_1\,\mathcal{P}\,-\,a_2\,\mathcal{X}\,)\,).$$

Por definição [84] [85] [344] [246]

$$\mathcal{O}_p^W\,(f) = \int_{\mathbb{R}^2} \tilde{f}(a_1,a_2)\,U(a_1,a_2)\ \frac{da_1\,da_2}{2\,\pi\,h},$$

é o operador quantização de Weyl agindo em $\mathcal{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{R})$.

Se f é uma função tomando valores reais, então $\mathcal{O}_p^W\,(f)$ é um operador auto-adjunto. Obtemos assim uma associação de observáveis clássicos a observáveis quânticos de uma forma sistemática e definida de forma única.

Desta forma, para todo $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$, temos que

$$\Big[[\mathcal{O}_p^W\,(f)]\,(\psi)\Big]\,(x) = \int_{\mathbb{R}^2} \tilde{f}(a_1,a_2)\,\Big[U(a_1,a_2)\,(\psi)\Big]\,(x)\ \ \frac{da_1\,da_2}{2\,\pi\,h} =$$

$$\int_{\mathbb{R}^2} \tilde{f}(a_1,a_2)\ exp(-\,\frac{i}{2\,\hbar}\,a_1\,a_2\,)\ exp(\,\frac{i}{\hbar}\,a_2\,x\,)\ \psi(x-a_1)\ \ \frac{da_1\,da_2}{2\,\pi\,h}\ = \phi(x)$$

define uma função ϕ que está em $\mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$.

Por exemplo, se pode mostrar que $\Big[[\mathcal{O}_p^W\,(x^2)]\,(\psi)\Big]\,(x) = \,x^2\psi(x) = \mathcal{X}^2(\psi)(x)$. Ou seja, $[\mathcal{O}_p^W\,(x^2)] = \mathcal{X}^2$. Da mesma forma, $[\mathcal{O}_p^W\,(p^2)] = \mathcal{P}^2$.

Se $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$, então $\mathcal{O}_p^W(f)$ é trace class. Além disto $\tau(\mathcal{O}_p^W(f)) = \frac{1}{2\pi h} \int f(a_1, a_2) da_1\, a_2$ [85].

$f(.,.) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ é chamado de símbolo de Weyl de $\mathcal{O}_p^W(f)$. Da mesma forma, (mas, de maneira mais geral) podemos dizer que $f \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^2)$ é o símbolo de $\mathcal{O}_p^W(f)$. Por exemplo, $\frac{1}{2\pi h}\delta(z-0)$ é o símbolo do operador identidade $I : \mathcal{S}(\mathbb{R}^2) \to \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$ [85].

Pode-se mostrar que para todo a e $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}\times\mathbb{R})$, $f(q,p) \to \mathbb{C}$, temos (usando a notação da seção anterior) que

$$\lim_{h\to 0} (\eta_a,\, [\mathcal{O}_p^W\, f\,]\, \eta_a) = \, f(a)\,,$$

onde η_a foi obtida a partir do pacote de ondas Gaussiano como descrito na seção anterior.

Desta forma os estados coerentes e a quantização de Weyl se harmonizam na formulação de uma estrutura que de certa forma traduz, no limite em $h \to 0$, o que se espera do mundo clássico.

Outra questão interessante é a eventual relação entre o colchete de Poisson (mundo clássico na seção 1.2) e o Comutador de operadores (mundo quântico na seção 1.2). Se pode mostrar (ver [90]) que dados $f(.,.), g(.,.) \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^2)$

$$[\,\mathcal{O}_p^W(f),\, \mathcal{O}_p^W(g)\,] \, = \, \mathcal{O}_p^W(\{f,g\}) \, + O(h^2).$$

Desta forma no limite semi-clássico $\hbar \to 0$, neste sentido, o mundo quântico se torna similar ao mundo clássico. Vamos explorar um pouco mais as questões do limite semi-clássico relacionadas ao conceito de microsuporte.

Limite semi-clássico e microsuporte

O pacote Gaussiano $x \in \mathbb{R}, \xi \in \mathbb{R}$ é descrito por

$$z \to \tilde{\varphi}_{x,\xi}(z) = \, \exp\left(\frac{i}{\hbar}\, m\, v\, z\,\right)\, e^{-\frac{(z-x)^2}{4\,a^2}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\xi\, z\,\right)\, e^{-\frac{(z-x)^2}{4\,\hbar}}.$$

Ele descreve um partícula quântica com posição x e momento $\xi = m\,v$. A variancia da posição estamos tomando $a = \sqrt{\hbar}$. Podemos também tomar $a = \sqrt{\hbar/m}$ e desta forma obteríamos a expressão

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\xi\, z\,\right)\, e^{-\frac{(z-x)^2}{4\,\hbar/m}}.$$

Neste último caso podemos considerar $\hbar$ e v_0 constantes, tomar $m \to \infty$, (em vez de $\hbar \to 0$) e deduzir um resultado semelhante ao que será obtido abaixo

Quando $\hbar \to 0$ a distribuição da posição de $\tilde{\varphi}_{x,\xi}$ vai ficar mais e mais concentrada em $x \in \mathbb{R}$. Vamos elaborar sobre isto em seguida.

Vamos no desenvolvimento abaixo considerar $a = \sqrt{\hbar}$.

Dizemos que $z(\hbar)$ (indexadas por $\hbar$) é da ordem $O(\hbar^\infty)$ se para qualquer $N > 0$ existe C_N e $\delta > 0$ tal que

$$|z(\hbar)| \leq C_N \, \hbar^N, \quad \text{para} \; |\hbar| \leq \delta.$$

Neste sentido $z(\hbar)$ vai muito rápido a zero quando $\hbar \to 0$.

Dada uma familia de funções $\psi_\hbar$, $\hbar \sim 0$, em $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$, dizemos que ela está **microlocalizada infinitamente pequena** perto de (x_0, ξ_0) se

$$z(\hbar) = | < \tilde{\varphi}_{x,\xi}, \psi_\hbar > |$$

é $O(\hbar^\infty)$ uniformemente numa vizinhaça fixa de (x_0, ξ_0). O complemento de tais pontos (x_0, ξ_0) é chamado de **micro-suporte** da familia $\psi_\hbar$.

Sendo assim no limite semiclássico se entende que pontos fora do microsuporte não são observados.

Uma boa referencia para o tópico em consideração é [246] e em particular o chapter 3.

No caso do pacote Gaussiano $\psi_\hbar(z) = e^{\frac{i}{\hbar}\xi_0 \, z} \; e^{-\frac{(z-x_0)^2}{4\,\hbar}}$ é natural perguntar sobre seu microsuporte.

Para $(y, \eta) \neq (x_0, \xi_0)$ o valor $z(\hbar) = | < \varphi_{y,\eta} \, , \, \varphi_{x_0,\xi_0} > |$ é $O(\hbar^\infty)$.

Acima $\varphi_{y,\eta}(z) = e^{\frac{i}{\hbar}\,\eta\, z} \; e^{-\frac{(z-y)^2}{4\,\hbar}}$.

Vamos mostrar agora que o microsuporte de $\tilde{\varphi}_{x_0,\xi_0} = \tilde{\varphi}^\hbar_{x_0,\xi_0}$ é apenas o ponto (x_0, ξ_0).

Vamos usar algums ideias originárias do método da fase não estacionária (ver [327] ou [94]).

O método da fase não estacionaria diz que se $a(x)$ for de classe C^∞ e $\phi(x)$ diferenciável e tal que $\phi'(x)$ não se anula no suporte de a, então

$$\int a(x) \, e^{i\lambda\phi(x)} \leq \lambda^{-N}$$

para todo inteiro $N > 0$, quando $\lambda \to \infty$.

Em vez de usar tal resultado vamos fazer as contas no exemplo específico que iremos considerar abaixo.

Note que

$$< \tilde{\varphi}_{(y,\eta)}, \tilde{\varphi}_{(x_0,\xi_0)} >= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-y)^2+(z-x_0)^2}{4h^2}} e^{\frac{iz(\eta-\xi_0)}{h}} dz$$

Caso 1: Suponha que $y \neq x_0$, então temos que

$$| < \tilde{\varphi}_{(y,\eta)}, \tilde{\varphi}_{(x_0,\xi_0)} > | \leq \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-y)^2+(z-x_0)^2}{4h^2}} dz$$

Note que $(z-y)^2 + (z-x_0)^2 = 2(z - \frac{x_0+y}{2})^2 + \frac{(x_0-y)^2}{2}$ portanto

$$| < \tilde{\varphi}_{(y,\eta)}, \tilde{\varphi}_{(x_0,\xi_0)} > | \leq \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2(z-\frac{x_0+y}{2})^2+\frac{(x_0-y)^2}{2}}{4h^2}} dz =$$

$$= e^{-\frac{(x_0-y)^2}{8h^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-\frac{x_0+y}{2})^2}{2h^2}} dz = e^{-\frac{(x_0-y)^2}{8h^2}} h\sqrt{2\pi}.$$

Caso 2: Suponha que $\eta \neq \xi_0$ e $y = x_0$, então vale que

$$< \tilde{\varphi}_{(y,\eta)}, \tilde{\varphi}_{(x_0,\xi_0)} >= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}} e^{\frac{iz(\eta-\xi_0)}{h}} dz$$

Seja $\phi(z) = z(\eta - \xi_0)$, assim $\phi'(z) = \eta - \xi_0 \neq 0$ para todo z, já que $\eta \neq \xi_0$. Defina o operador $L := \frac{h}{i} \frac{1}{\phi'(z)} \frac{d}{dz}$ e note que $L(e^{\frac{i\phi}{h}}) = e^{\frac{i\phi}{h}}$, assim usando a propriedade de L e integrando por partes temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}} e^{\frac{i\phi(z)}{h}} dz =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}} L(e^{\frac{i\phi(z)}{h}}) dz =$$

$$\frac{h}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}}}{\phi'(z)} \frac{d}{dz}(e^{\frac{i\phi(z)}{h}}) dz =$$

$$= \frac{h}{i(\xi_0 - \eta)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}} \frac{d}{dz}(e^{\frac{i\phi(z)}{h}}) dz =$$

$$-\frac{h}{i(\xi_0 - \eta)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dz}\big(e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}}\big) e^{\frac{i\phi(z)}{h}} dz$$

Note que $\frac{d}{dz}(e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}}) = e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}}\left(\frac{-z+x_0}{h^2}\right)$ muda de sinal apenas em $z = x_0$.

Assim temos que

$$\left|\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}} e^{\frac{i\phi(z)}{h}} dz\right| \leq \frac{h}{\xi_0-\eta}\int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{d}{dz}(e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}})\right| dz =$$

$$= \frac{h}{\xi_0-\eta}\left(\int_{-\infty}^{x_0-h^N}\frac{d}{dz}(e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}})dz + \int_{x_0-h^N}^{x_0+h^N} e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}}\left(\frac{|-z+x_0|}{h^2}\right)dz - \right.$$

$$\left. - \int_{x_0+h^N}^{\infty}\frac{d}{dz}(e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}})dz\right) \leq \frac{h}{\xi_0-\eta}\left(2e^{-\frac{h^{2N}}{2h^2}} + 2h^N\frac{h^N}{h^2}\right).$$

E portanto

$$\left|\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-x_0)^2}{2h^2}} e^{\frac{i\phi(z)}{h}} dz\right| \leq \frac{2h}{\xi_0-\eta}\left(e^{-\frac{h^{2N-2}}{2}} + h^{2N-2}\right).$$

Assim concluimos que o microsuporte está localizado em (x_0, ξ_0).

Um estado Lagrangiano é uma função da forma $\varphi : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$, onde

$$\varphi(x) = a(x) e^{\frac{i}{h}S(x)},$$

$a : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, $a \geq 0$ e $S : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ são funções reais e $\int a^2(x)dx = 1$.

Pode se mostrar (ver [12] e [246]) que o microsuporte de φ é o conjunto dado pelo gráfico da função $S'(x)$. Em [237] os autores analisam estados Lagrangianos periódicos e questões que envolvem dinâmica e o limite semiclásico.

2.17 Medidas de Wigner

O kernel ou medida de Wigner associado a uma certa $\phi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ é

$$W_\phi(q,p) = \int_{\mathbb{R}} \bar{\phi}(q+\frac{s}{2})\,\phi(q-\frac{s}{2})\,e^{i\frac{p\,s}{h}}\,\frac{ds}{2\,\pi\,h}.$$

Referimos o leitor interessado em mais detalhes sobre o tópico para chapter 6 in [85], [353], [87], [27], [127], [244], [226], [84], [344] ou [322].

Fixado ϕ os valores de $W_\phi(q,p)$ são reais mas podem ser negativos.

Vamos analisar agora algumas propriedades básicas da medida de Wigner.

Proposição 2.41.

$$\int \int_a^b W_\phi(q,p)\, dq\, dp \;= \int_a^b \; |\phi(q)|^2\, dq,$$

and

$$\int \int_c^d W_\phi(q,p)\, dq\, dp = \int_c^d \; |\hat{\phi}(p)|^2 dp,$$

Demonstração

Lembre que como função da variável s, a expressão $\int e^{+\frac{i}{h}\, p\, s}\, dp$ é uma distribuição, mais precisamente, a delta de Dirac em $s=0$, denotada por $(\frac{1}{2\pi\, h})\, \delta_0$.

A associação

$$f \to \frac{1}{2\pi\, h} \int [\int e^{+\frac{i}{h}\, p\, s}\, dp]\; f(s) ds,$$

é a delta Dirac em zero. Ou seja, $f \to f(0)$.

Este resultado é semelhante ao que foi deduzido antes (ver 1.13 e 1.14 na seção 1.14) mas com uma mudança de sinal (lá seria $\int e^{-\frac{i}{h}\, p\, s}\, dp$).

Vamos mostrar a afirmação no caso acima $\int e^{+\frac{i}{h}\, p\, s}\, dp$. Segue facilmente do uso da Transformada de Fourier inversa que

$$f(x) = (\frac{1}{2\pi\, h})^{1/2} \int e^{-\frac{i}{h}\, x\, p}\; \check{f}(p)\, dp =$$

$$(\frac{1}{2\pi\, h})^{1/2} \int e^{-\frac{i}{h}\, x\, p} \left[(\frac{1}{2\pi\, h})^{1/2} \int e^{\frac{i}{h}\, s\, p}\; f(s)\, ds \right] dp.$$

Consideraremos agora a expressão acima apenas quando $x=0$. Obtemos assim

$$f(0) = (\frac{1}{2\pi\, h})^{1/2} \int \; \left[(\frac{1}{2\pi\, h})^{1/2} \int e^{\frac{i}{h}\, s\, p}\; f(s)\, ds \right] dp.$$

Acima f pode ser tomada indistintamente como função de x ou s.

Assim, para q fixo, tome acima $f(s) = \bar{\phi}(q+\frac{s}{2})\, \phi(q-\frac{s}{2})$, então

$$\int W_\phi(q,p)\, dp \;= \int [\int_{\mathbb{R}} \bar{\phi}(q+\frac{s}{2})\, \phi(q-\frac{s}{2})\, e^{i\frac{p\, s}{h}}\, \frac{ds}{2\,\pi\, h}\;]\, dp = \; \bar{\phi}(q)\, \phi(q).$$

Isto mostra que $\int\, W_\phi(q,p)\, dp \;=\; |\phi(q)|^2$.

Vamos agora demostrar a outra afirmação.

Para um p fixo, considere agora a mudança de variável $x' = (q + \frac{s}{2})$ and $x'' = (q - \frac{s}{2})$. Note que a matriz Jacobiana da mudança de coordenadas $(q, s) \to (x', x'')$ tem determinante de modulo igual a 1. Note ainda que $s = x' - x''$.

Obtemos então

$$\int W_\phi(q,p)\, dq = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \overline{\phi(x')\, e^{-i\frac{p\,x'}{h}}}\, \phi(x'')\, e^{-i\frac{p\,x''}{h}}\, \frac{dx'}{2\,\pi\,h}\, dx'' =$$

$$\overline{\int_{\mathbb{R}} \phi(x')\, e^{-i\frac{p\,x'}{h}}\, dx'} \times \int_{\mathbb{R}} \phi(x'')\, e^{-i\frac{p\,x''}{h}}\, \frac{dx''}{2\,\pi\,h} = \overline{\hat{\phi}}\,(p)\ \hat{\phi}(p) = |\hat{\phi}(p)|^2$$

□

O resultado acima indica que a medida de Wigner é uma espécie de medida com sinal (lembre que pode tomar valores negativos) tal que suas marginais descrevem a posição e o momento de uma partícula quântica. Em [301] resultados explicitos são apresentados. A relação entre quantização de Weyl e a medida de Wigner é descrita pelo próximo resultado.

Proposição 2.42. *$\mathcal{O}_p^W$ satisfaz, para todo $\phi \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ e f tomando valores reais:*

$$<\ \phi, \mathcal{O}_p^W\, f\,(\phi)\ >= \int_{\mathbb{R}^2} f(q,p)\, W_\phi(q,p)\, dq\, dp.$$

De fato, a expressão para W_ϕ pode ser derivada por integração por partes a partir desta propriedade e da definição de $\mathcal{O}_p^W$.

Demonstração:

De fato, basta verificar que

$$<\ \phi, \mathcal{O}_p^W\, f\,(\phi)\ >=$$

$$\int \phi(x) \overline{\tilde{f}(a_1,a_2)} e^{\frac{i}{2\hbar}a_1 a_2} e^{-\frac{i}{\hbar}x a_2} \overline{\phi(x-a_1)} \frac{dx da_1 da_2}{2\pi\hbar} =$$

$$\int \phi(x+\frac{a_1}{2}) \overline{\tilde{f}(a_1,a_2)} e^{\frac{i}{2\hbar}a_1 a_2} e^{-\frac{i}{\hbar}(x+\frac{a_1}{2})a_2} \overline{\phi(x-\frac{a_1}{2})} \frac{dx da_1 da_2}{2\pi\hbar} =$$

$$-\int \phi(x-\frac{a_1}{2})\overline{\tilde{f}(-a_1,a_2)}e^{-\frac{i}{\hbar}a_2 x}\overline{\phi(x+\frac{a_1}{2})}\frac{dx da_1 da_2}{2\pi\hbar} =$$

$$-\int \phi(x-\frac{a_1}{2})\overline{\phi(x+\frac{a_1}{2})}e^{-\frac{i}{\hbar}a_2 x}f(y,z)e^{-\frac{i}{\hbar}(-a_1 z - a_2 y)}\frac{dydzdxda_1da_2}{(2\pi\hbar)^2} =$$

$$-\int [\frac{\phi(x-\frac{a_1}{2})\overline{\phi(x+\frac{a_1}{2})}e^{\frac{i}{\hbar}a_1 z}}{2\pi\hbar}][\frac{f(y,z)e^{\frac{i}{\hbar}a_2(y-x)}}{2\pi\hbar}]da_1da_2dydzdx =$$

$$\int W_\phi(x,z)[\frac{f(y,z)e^{-\frac{i}{\hbar}a_2(y-x)}}{2\pi\hbar}]dyda_2dxdz =$$

$$\int W_\phi(x,z)[\frac{\hat{f}(a_2,z)e^{\frac{i}{\hbar}a_2 x}}{\sqrt{2\pi\hbar}}]da_2dxdz =$$

$$\int W_\phi(x,z)f(x,z)dxdz =$$

$$\int_{\mathbb{R}^2} f(q,p)\, W_\phi(q,p)\, dq\, dp$$

Observe que a segunda igualdade vem de uma substituição na qual se toma $x = x + \frac{a_1}{2}$, na terceira substituimos $a_1 = -a_1$. Na quarta igualdade usamos a definição de transformada de Fourier simplética. Logo após, substituímos $a_2 = -a_2$ e usamos a definição de W_ϕ. Nesta demonstração, $\hat{f}(p,y)$ denota a transformada de Fourier de $f(x,y)$ na primeira variável.

□

Observe ainda que a associação de $f(q,p)$ a um correspondente operador quantizado $\mathcal{O}_p^W f$, descrita pela quantização de Weyl, permite o cálculo do traço de $\mathcal{O}_p^W f$ via

$$\text{traço } \mathcal{O}_p^W f = \int\int f(q,p)dq\, dp.$$

Referimos o leitor a [85] seção 9.2.2 para a prova desta afirmação.

Finalmente, podemos considerar (ver exercício 2.15 em [84])

$$W_{(a_1,a_2)}(q,p) = W_{\eta_{(a_1,a_2)}}(q,p) \;=\; \frac{1}{\pi h}\, e^{-\frac{(q-a_1)^2}{\Delta_q^2}}\; e^{-\frac{(p-a_2)^2}{\Delta_p^2}}\;,$$

onde $\eta_{(a_1,a_2)}$ foi obtido a partir do pacote de ondas Gaussiano como na seção anterior.

As únicas funçoes de Wigner que são totalmente não negativas são aquelas associadas a pacotes de onda Gaussianos [21] section 15.2 (como descrita acima).

Vamos considerar agora outro exemplo importante em que q está no toro n-dimensional e o momento p em $\mathbb{R}^n$, sendo assim ilimitado.

Abaixo vamos considerar $h = 2\pi\Delta_q\Delta_p$. Os valores Δ_q e Δ_p são apenas constantes de normalização que irão aparecer nas contas em breve.

Lembre que o toro $\mathbb{T}^2$ é obtido como o conjunto $[0,2\pi)\times[0,2\pi)\subset\mathbb{R}^2$ com a identificação usual da fronteira.

Para $f \in \mathcal{S}(\mathbb{T}^2 \times \mathbb{R}^2)$, da forma para $f(q_1,q_2,p_1,p_2)$, temos que a (série-transformada) de Fourier é definida como

$$\tilde{f}(n_1,n_2,\xi_1,\xi_2) =$$

$$\int_0^{\Delta_q}\int_0^{\Delta_q}\int_{\mathbb{R}^2} f(q_1,q_2,p_1,p_2)\, e^{\frac{i}{h}\,(\,[\,(n_1\,q_1+n_2\,q_2)]\,-(\xi_1\,p_1+\xi_2\,p_2)\,h\,)}\;\frac{dq_1\,dq_2\,dp_1\,dp_2}{(2\,\pi\,h)^2}.$$

Desta forma obtemos de volta a f via a expressão (ver [144])

$$f(n_1,n_2,\xi_1,\xi_2) =$$

$$\sum_{n_1\in\mathbb{Z}}\sum_{n_2\in\mathbb{Z}}\int_{\mathbb{R}^2}\tilde{f}(n_1,n_2,\xi_1,\xi_2)\, e^{\frac{i}{h}\,(\,-(\xi_1\,p_1+\xi_2\,p_2)\,+\,[\,\Delta_q\,(n_1\,q_1+n_2\,q_2)\,]\,)}\;\frac{d\xi_1\,d\xi_2}{(2\,\pi\Delta_q)^2}.$$

Finalmente, para $f \in \mathcal{S}(\mathbb{T}^2 \times \mathbb{R}^2)$,

$$(\,\mathcal{O}_p^W\,(f)\,)\;=$$

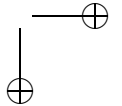
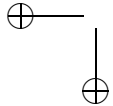
$$\sum_{n_1,n_2\in\mathbb{Z}}\int_{\mathbb{R}^2}\tilde{f}(n_1,n_2,\xi_1,\xi_2)\, e^{\frac{i}{h}\,(\,[\Delta_q\,(n_1\,P_1+n_2\,P_2)]\,-(\xi_1\,Q_1+\xi_2\,Q_2)\,)}\,\frac{d\xi_1\,d\xi_2}{2\pi\Delta_q},$$

onde $\mathcal{X}_1$ é a multiplicação por x_1, $\mathcal{X}_2$ é a multiplicação por x_2, $[\mathcal{P}_1(\psi)](x) = \frac{h}{i}\,\frac{\partial\psi}{\partial x_1}(x)$ e $[\mathcal{P}_2(\psi)](x) = \frac{h}{i}\,\frac{\partial\psi}{\partial x_2}(x)$.

Conforme descrito anteriormente considere a família $\{P_a\}_{a\in\Omega}$ de estados coerentes.

Nós chamamos a função densidade $\mathcal{O}_\rho : \Omega \to \mathbb{R}^+$, dada pela fórmula

$$\mathcal{O}_\rho(a) := \text{traço}\,(P_a\,\rho),$$

de distribuição de Husimi generalizada correspondente ao estado ρ.

Exemplo 2.13. Considere $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, e seja P, Q os operadores posição e momento. Seja $\alpha \in \mathcal{H}$ um vetor de norma um no domínio de Q and P tal que $< P\alpha|\alpha >=< Q\alpha|\alpha >= \int x\,|\alpha(x)|^2\,dx = 0$.

Vamos definir $\alpha_{yz} \in \mathcal{H}$ por

$$\alpha_{yz}(q) \,=\, e^{i\,(\sum_{j=1}^3 \bar{z}_i\, q_i\,)\ \alpha(q-y)},$$

para $q \in \mathbb{R}^3$ and $(y, z) \in \mathbb{R}^6$. Então, α_{yz} são estados coerentes.

Considere $\Omega = \mathbb{R}^6$, m a medida de Lebesgue, e $P_{yz} = |\alpha_{yz} >< \alpha_{yz}|$, para todo $(y, z) \in \mathbb{R}^6$.

A função $(y, z) \to \mathcal{O}_\rho(y, z) \;=<\; \alpha_{yz}| \;<\; \rho\,|\,\alpha_{yz} \;>$ é chamada de distribuição de Husimi ordinária.

2.18 Mecânica de Bohm e a equação de Hamilton-Jacobi

O ponto principal nesta seção é apresentar uma versão alternativa ao uso da fundamental equação de Schrodinger. A evolução temporal dos estados será descrita por fluxos de probabilidades, equações de transporte e principios variacionais de mínima ação. Uma expressão mais geral da equação de Hamilton-Jacobi desempenha um papel crucial neste ponto de vista. Alguns textos se referem a tal formalismo como um parte integrante do ponto de vista de Bohm da Mecânica Quântica. Não vamos discutir aqui o que significa isto exatamente do ponto de vista do fenômeno físico.

Uma referencia abrangente cobrindo vários aspectos da Mecânica de Bohm é [103] (ver também [180]).

A Mecânica d Bohm não está em contradição com a teoria da Relatividade (ver seção 6 em [338]).

Para motivar o assunto vamos primeiramente apresentar brevemente o formalismo da equação de Hamilton-Jacobi no setting da Mecânica Clássica.

Assumimos que $S(t, x)$, x no toro $n-$dimensional Λ, satisfaz a equação de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2\,m}\,|\nabla_x(S)|^2 + V = 0, \tag{2.85}$$

associada ao Hamiltoniano $H(q, p) = \frac{p^2}{2\,m} + V(q)$, onde V é diferenciável infinitas vezes. Esta equação esta ligada a Mecanica Clássica e não Quântica.

Acima estamos considerando o toro com a métrica flat.

Ressaltamos que nem sempre este S pode ser definido em todo toro de forma diferenciável. A partir de condiçoes iniciais fixadas se pode definir localmente uma solução infinitamente diferenciável (ver [9], [250] e [228]). Muitas vezes ocorrem singularidades (pontos de cáusticas) e em certos casos se pode extender a solução infinitamente diferenciável de forma contínua, mas isto depende muito da forma especial do potencial.

O estudo das soluções de viscosidade e da Teoria de Aubry-Mather permite encontrar soluções da equação acima de um ponto de vista diferente [119]. Se busca funções contínuas $S(x,t)$, para todo x no toro Λ e $t \in \mathbb{R}$, tais que para x fora de um conjunto de medida de Lebesgue zero no Toro exista a derivada parcial de S em relação a x, e nestes pontos a equação acima seja verdadeira. Este seria um ponto de vista de obter soluções globais, mas de uma forma dita fraca.

Assumimos agora que exista uma evolução temporal de probabilidades cujas densidades sejam denotadas por $P_t(x) = P(t,x)$.

Desta forma, para qualquer t temos que $\int P(t,x)dx = 1$.

Assumimos também que esta evolução temporal seja governada por um fluxo gradiente não autonomo dado por $\nabla_x S(t,x)$, onde, $S : [0,R] \times T \to \mathbb{R}$. Isto significa que a equação de continuidade seja preservada, ou seja, que $P(t,x)$ satisfaça

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \operatorname{div}_x(P \frac{1}{m} \nabla S) = 0. \tag{2.86}$$

S descreve a ação associada os sistema mecânico clássico.

Lembre que a equação do transporte apareceu na seção 1.11 de maneira natural a partir da equação de Schrodinger.

$P \frac{1}{m} \nabla S$ é chamada de corrente de probabilidade associada a P e S. Se $P(t,x)$ é tal que não depende de t (estacionariedade), então se obtem a expressão: $\operatorname{div}_x(P \frac{1}{m} \nabla S) = 0$.

Note que se ϕ é da forma $\phi(x) = A\, e^{i\,S/h}$, onde $A \geq 0$ e S são funções reais, então, podemos escrever $P \frac{1}{m} \nabla S$, que é a corrente de probabilidade, na forma $\frac{h}{2m\,i}\,(\overline{\phi}\nabla\phi - \phi\nabla\overline{\phi})$ (ver [160] Definição 2.5.1).

Podemos considerar outro tipo de problema (que será o mesmo ao final): seja $T > 0$ fixo, então para quaisquer $S(t,x)$ e $P(t,x)$ (uma familia de densidades parametrizadas por t) denote sua ação por

$$A(S,P) \,=\, \int_0^T \, P(t,x)\,[\,\frac{\partial S(t,x)}{\partial t} + \frac{1}{2\,m}\,|\nabla_x (S(t,x))|^2 + V(x)\,]\,dx\,dt.$$

Considere para um dado $T > 0$ que estão fixadas as condições iniciais e finais $S_0(0,x)$, $S_1(T,x)$, $P_0(R,x)$, $P_1(R,x)$.

Estamos interessados nos $S(x,t)$ and $P(x,t)$ que são críticos para a ação A acima descritas, com as condições fixas em $t = 0$ e $t = T$, dados pelos S_0, S_1, P_0, P_1 acima.

Dizer que um certo **par** $\hat{S}(x,t)$ **and** $\hat{P}(x,t)$ **é crítico para a ação** A significa que para qualquer família de variações $S_s(x,t)$ and $P_s(x,t)$, indexada por $s \in (-\epsilon, \epsilon)$, $\epsilon > 0$, tal que $S_0(x,t) = \hat{S}(x,t)$ e $P_0(x,t) = \hat{P}(x,t)$ temos que

$$\frac{d\,A(S_s, P_s)}{ds}|_{s=0} = 0.$$

Note que se o par $\hat{S}(x,t)$ and $\hat{P}(x,t)$ for mínimo para A então ele é crítico.

Observe que, a menos do termo $P(t,x)$, o problema acima tem uma certa similaridade com o principio clássico de ação crítica [229].

Resultados relacionados ao tópico em análise apareceram em [180] [341] [147] [108] [261] [343] e [64].

Pode-se mostrar que as familias $S(t,x)$ e $P(t,x)$ que são críticas para a ação satisfazem (2.78) e (2.79) acima. A prova desta propriedade segue de um resultado mais geral que será considerado em breve. Esta ação que consideramos acima não tem sentido quântico. Ela descreve a evolução temporal natural de probabilidades (densidades) segundo o fluxo Hamiltoniano Clássico.

Vamos considerar agora um novo tipo de ação: para quaisquer familias $S(t,x)$ e $P(t,x)$ (uma familia de densidades no Toro indexada por t) denote a q-action [180] [185] (q de quantum) por

$$A_q(S,P) \;=\; \int_0^T \; P(t,x)\,[\,\frac{\partial S(t,x)}{\partial t} + \frac{1}{2\,m}\,|\nabla_x(S(t,x))|^2 + V(x) \;+$$

$$\frac{(h/2)^2}{2\,mP^2(t,x)}\,|\nabla_x(P(t,x))|^2\;\,]\,dx\,dt.$$

A diferença do caso anterior é que apareceu um novo termo (o último) que de certa forma é um potencial que depende de P:

$$U_q(P)(x) = \frac{(h/2)^2}{2\,mP^2(t,x)}\,|\nabla_x(P(t,x))|^2$$

O efeito deste potencial é diminuir o potencial clássico V onde P tem pontos de máximo. U_q foi denominado de potencial quântico a seção 1.11.

De forma análoga ao caso anterior fixe $S_0(0,x)$, $S_1(T,x)$, $P_0(0,T,x)$, $P_1(0,T,x)$.

Considere os S e P que são críticos para as variações da ação A_q com extremos fixos em $t=0$ e $t=T$, dados respectivamente por S_0, S_1, P_0, P_1.

Vamos mostrar abaixo que as variações críticas implicam que

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2\,m}\,|\nabla_x\, S|^2 + V(x) \;=\; [\frac{h^2\,\Delta_x\;a}{2\,m\;a}].$$

Mais precisamente, as variações críticas por P resultam na condição

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2\,m}\,|\nabla_x(S)|^2+V+[\frac{(h/2)^2}{2\,mP^2(t,x)}\,|\nabla_x(P(t,x))|^2-\frac{(h/2)^2}{mP(t,x)}\,\Delta_x P\,]=0$$

para a solução crítica.

Isto também pode ser escrito como

$$\frac{\partial S(t,x)}{\partial t} + \frac{1}{2\,m}\,|\nabla_x(S(t,x))|^2 + V(x) - \,[\frac{h^2\,\Delta_x\;P^{1/2}(t,x)}{2\,m\;P^{1/2}(t,x)}] = 0 \quad (2.87)$$

Lembre que na seção 1.11 mostramos que se $\psi(t,x) = a(t,x)e^{i\,S(t,x)/h}$, onde a e S são funções reais, satisfaz a equação de Schrodinger

$$i\,h\,\frac{\partial\,\psi}{\partial\,t} \;=-\frac{h^2}{2m}\,\Delta_x\psi\,+\,V\,\psi,$$

então, denotando $P=a^2$, temos que P e S satisfaz(2.85) e (2.86).

Em termos de a obtivemos naquela seção que

$$\frac{\partial a^2}{\partial t} + \mathrm{div}_x(a^2\,\frac{1}{m}\,\nabla_x S) = 0,$$

e

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2\,m}\,|\nabla_x\,S|^2 + V(x) \;=$$

$$[\frac{h^2\,\Delta_x\;a}{2\,m\;a}].$$

Segue do desenvolvimento abaixo que um princípio de minima ação pode substituir a equação de Schrodinger.

Lembre que se a condição inicial $\psi(0,x) = a(0,x)e^{i\,S(0,x)/h}$ em tempo $t=0$ for uma autofunção de $\mathbf{H}$ então a evolução temporal é tal que a amplitude a^2 não varia. Neste caso obtemos a condição

$$\text{div}_x(a^2\,\frac{1}{m}\,\nabla_x S) = 0.$$

Vamos agora apresentar as provas dos enunciados acima.

Primeiro vamos descrever um problema variacional sem a componente quântica. Mais tarde consideraremos o outro caso.

Seja um aberto $\Lambda \subseteq \mathbb{R}^n$ e seja $P : [0,T] \times \Lambda \to \mathbb{R}$ uma família a um parâmetro de densidades de probabilidades sobre Λ, i.e.

$$\int_\Lambda P(x,t)dx = 1,\, \forall t \in [0,T].$$

Seja ainda $S : [0,T] \times \Lambda \to \mathbb{R}$ uma família a um parâmetro de funções diferenciáveis. Definimos a *ação* em P e S por

$$A(S,P) = \int_0^T \int P(t,x) \left[\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x)\right] dxdt, \qquad (2.88)$$

onde $V : \Lambda \to \mathbb{R}$ é um potencial e ∇ denota o gradiente na coordenada espacial.

Primeiro iremos tratar do caso clássico.

Teorema 2.43. *Seja A o operador definido pela equação* (2.88). *Então se o par $(P,\,S)$ é um ponto crítico de A, ele satisfaz as seguintes equações:*

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x) & = & 0 \\ \frac{\partial P}{\partial t} + div\left(\frac{P\nabla S}{m}\right) & = & 0. \end{cases}$$

Demonstração. Seja (P,S) um ponto crítico de A e considere para $\tau \in (-\varepsilon,\,\varepsilon)$ P_τ, S_τ uma família de variações de P e S, respectivamente, satisfazendo, $\forall \tau \in (-\varepsilon,\,\varepsilon)$

$$\begin{aligned}\int_\Lambda P_\tau(t,x)dx = 1, \quad \forall t\in[0,T];\\ P_\tau(0,x)=P(0,x),\ P_\tau(T,x)=P(T,x), \qquad \forall x\in\Lambda;\\ S_\tau(0,x)=S(0,x),\ S_\tau(T,x)=S(T,x), \qquad \forall x\in\Lambda,\end{aligned}$$

ou seja, a variação é própria e preserva o fato de P ser probabilidade. Defina a ação $A(\tau)=A(P_\tau,\, S_\tau)$. Então, derivando A segue que

$$\begin{aligned} A'(\tau) &= \int_0^T\int_\Lambda \frac{\partial P_\tau}{\partial\tau}\left[\frac{\partial S_\tau}{\partial t}+\frac{1}{2m}|\nabla S_\tau|^2+V(x)\right]dxdt \\ &\quad + \int_0^T\int_\Lambda P\left(\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial S_\tau}{\partial\tau}+\frac{1}{m}\nabla S_\tau\cdot\nabla\frac{\partial S_\tau}{\partial\tau}\right)dxdt.\end{aligned}$$

Como $(P,\, S)$ é crítico de A, temos que $A'(0)=0$ para qualquer variação de $(P,\, S)$. Com isso, definindo as funções

$$\begin{aligned} W(x,t) &= \left.\frac{\partial P_\tau}{\partial\tau}\right|_{\tau=0}(x,t)\\ U(x,t) &= \left.\frac{\partial S_\tau}{\partial\tau}\right|_{\tau=0}(x,t),\end{aligned}$$

obtemos que

$$\begin{aligned} 0 &= \int_0^T\int_\Lambda W\left[\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}|\nabla S|^2+V(x)\right]dxdt+\int_0^T\int_\Lambda P\frac{\partial U}{\partial t}dxdt \qquad (2.89)\\ &\quad +\int_0^T\int_\Lambda P\frac{1}{m}\nabla S\cdot\nabla U dxdt.\end{aligned}$$

Utilizando integração por partes e observando que a variação é própria, chegamos às identidades

$$\begin{aligned}\int_0^T P\frac{\partial U}{\partial t}dt &= -\int_0^T\frac{\partial P}{\partial t}Udt\\ \int_\Lambda P\frac{1}{m}\nabla S\cdot\nabla U dx &= -\int_\Lambda \operatorname{div}\left(\frac{P\nabla S}{m}\right)Udx.\end{aligned}$$

Na expressão acima podemos supor U e W com suporte compacto em x para cada t. Com esta condição é válida a igualdade.

Com isso, a equação (2.89) torna-se

$$\int_0^T \int_\Lambda W \left[\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x)\right] dxdt -$$

$$\int_0^T \int_\Lambda U \left[\frac{\partial P}{\partial t} + \mathrm{div}\left(\frac{P\nabla S}{m}\right)\right] dxdt = 0.$$

Pela arbitrariedade de U e W, segue o resultado.

□

Vamos definir agora uma ação com componente quântico. Isto significa acrescentar um termo mais a ação anterior. Obteremos desta forma uma equação diferencial parcial associada a Mecânica Estocástica de Nelson (ver seções 13 e 14 em [263]). Novamente para P e S como anteriormente defina

$$A_q(S,P) = \int_0^T \int_\Lambda P \left[\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x) + c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2\right] dxdt. \tag{2.90}$$

Vamos mostrar o seguinte resultado:

Teorema 2.44. *Seja (S,P) um par crítico para o funcional A_q definido por (2.90). Então S e P satisfazem as seguintes equações:*

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x) + c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2 - 2c\left(\frac{\Delta P}{P}\right) &= 0 \\ \frac{\partial P}{\partial t} + div\left(\frac{P\nabla S}{m}\right) &= 0. \end{cases}$$

Desta forma recuperamos a equação anteriormente obtida na seção 1.11 via um princípio variacional.

A expressão

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x) + c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2 - 2c\left(\frac{\Delta P}{P}\right) = 0$$

pode ser escrita como

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x) - 2\, m\, \nu^2 \frac{\Delta \sqrt{P}}{\sqrt{P}} = 0, \tag{2.91}$$

onde assumimos que $2\, m\, \nu = \hbar$ (ver (9), (10) (12) em [148]).

A equação nesta forma é conhecida com a equação de Hamilton-Jacobi-Madelung (conforme [148])

Demonstração. Sejam novamente P_τ, S_τ variações de P e S como na demonstração do teorema anterior. Então, definindo novamente $A_q(\tau) = A_q(P_\tau, S_\tau)$, derivando e fazendo $\tau = 0$ na expressão encontramos

$$\begin{aligned} &\int_0^T \int_\Lambda W\, [\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x) + c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2\,]\; dxdt \\ &+ \int_0^T \int_\Lambda P\frac{\partial U}{\partial t} dxdt + \int_0^T \int_\Lambda P\frac{1}{m}\nabla S \cdot \nabla U dxdt \\ &+ c\int_0^T \int_\Lambda \frac{2}{P}\nabla P \cdot \nabla W\, dxdt - c\int_0^T \int_\Lambda \frac{2}{P^2} W|\nabla P|^2 dxdt, \end{aligned} \tag{2.92}$$

onde novamente denominamos

$$\begin{aligned} W(x,t) &= \left.\frac{\partial P_\tau}{\partial \tau}\right|_{\tau=0} (x,t) \\ U(x,t) &= \left.\frac{\partial S_\tau}{\partial \tau}\right|_{\tau=0} (x,t). \end{aligned}$$

Para P e S serem críticos, qualquer variação deles deve resultar no anulamento da expressao acima.

Utilizando integração por partes, podemos observar novamente as seguintes identidades:

$$\begin{aligned}
\int_0^T P\frac{\partial U}{\partial t}dt &= -\int_0^T \frac{\partial P}{\partial t}U dt,\\
\int_\Lambda \frac{P}{m}\nabla S\cdot\nabla U dx &= -\int_\Lambda \operatorname{div}\left(\frac{P\nabla S}{m}\right)U dx,\\
\int_\Lambda \frac{1}{P}\nabla P\cdot\nabla W dx &= -\int_\Lambda \operatorname{div}\left(\frac{\nabla P}{P}\right)W dx.
\end{aligned}$$

Substituindo tais expressões em (2.92), podemos reorganizar os termos e ficamos com

$$\begin{aligned}
&\int_0^T\int_\Lambda W[\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}|\nabla S|^2+V(x)+c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2]dxdt\\
&-\int_0^T\int_\Lambda U\frac{\partial P}{\partial t}dxdt-\int_0^T\int_\Lambda U\operatorname{div}\left(\frac{P\nabla S}{m}\right)dxdt\\
&-2c\int_0^T\int_\Lambda W\operatorname{div}\left(\frac{\nabla P}{P}\right)dxdt-2c\int_0^T\int_\Lambda W\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2dxdt \;=\; 0,
\end{aligned}$$

e portanto

$$0=\int_0^T\int_\Lambda W\,[\,\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}|\nabla S|^2+V(x)+$$

$$c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2-2c\operatorname{div}\left(\frac{\nabla P}{P}\right)-2c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2\,]\;dxdt$$

$$-\int_0^T\int_\Lambda U\left[\frac{\partial P}{\partial t}+\operatorname{div}\left(\frac{P\nabla S}{m}\right)\right]dxdt=$$

$$\int_0^T\int_\Lambda W\left[\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}|\nabla S|^2+V(x)-c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2-2c\operatorname{div}\left(\frac{\nabla P}{P}\right)\right]dxdt$$

$$-\int_0^T\int_\Lambda U\left[\frac{\partial P}{\partial t}+\operatorname{div}\left(\frac{P\nabla S}{m}\right)\right]dxdt$$

Como a expressão acima deve ser zero para todo U e W obtemos o resultado desejado.

Agora, observe que

$$-2c\mathrm{div}\left(\frac{\nabla P}{P}\right) = 2c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2 - 2c\frac{1}{P}\Delta P, \tag{2.93}$$

portanto

$$\begin{aligned} & \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x) - c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2 - 2c\,\mathrm{div}\left(\frac{\nabla P}{P}\right) \\ = & \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x) - c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2 + 2c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2 - 2c\frac{1}{P}\Delta P \\ = & \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x) + c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2 - 2c\frac{1}{P}\Delta P. \end{aligned} \tag{2.94}$$

Com isso, a equação anterior se torna

$$\begin{aligned} 0 = & \int_0^T \int_\Lambda W \left[\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}|\nabla S|^2 + V(x) + c\frac{1}{P^2}|\nabla P|^2 - 2c\frac{1}{P}\Delta P\right] dxdt \\ & - \int_0^T \int_\Lambda U \left[\frac{\partial P}{\partial t} + \mathrm{div}\left(\frac{P\nabla S}{m}\right)\right] dxdt. \end{aligned}$$

Disto segue o que afirma o teorema.

□

2.19 Espalhamento

Vamos analisar nesta seção o espalhamento de estados. O modelo que o leitor deve ter em mente é o seguinte: consideramos um potencial para o qual existe uma certa região delimitada e finita do espaço em que ele tem maior influência. Sua ação se torna bem mais fraca sobre partículas que estão a distâncias muito grandes. Uma partícula quântica muito longe desta zona é governada praticamente pelo potencial nulo; ao se aproximar da zona de maior ação do potencial, ela se altera, e, após esta ocorrência, ela se afasta novamente da zona de influência do potencial.

Sendo assim, a evolução temporal do estado, que inicialmente era próxima daquela governada pelo potencial nulo, é tal que com o decorrer do tempo ele é refletido, e, posteriormente, volta a ter outra vez um comportamento estatístico temporal similar a de uma partícula livre quântica.

Vamos analisar aqui a descrição matemática deste fenômeno apenas no caso de dimensão um. Uma descrição bastante completa do assunto no caso geral pode ser encontrada em [291] ou Lecture 10 em [95].

O tópico desta seção é de grande importância nas questões práticas. Muitas vezes é dificil inferir qual o potencial que realmente atua num sistema quântico dado. Este então é bombardeado com outras partículas. A Teoria do Espalhamento (via o assim chamado problema inverso) permite descobrir qual o potencial que deve ser considerado no problema em análise.

Considere um Hamiltoniano $\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle + V(x)$, onde $V(x) \overset{|x|\to+\infty}{\longrightarrow} 0$, e, um estado ϕ que é solução da equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial\, t} = \mathcal{H}\psi$$

$$\psi|_{t=0} = \psi_0 \qquad\qquad (1).$$

Intuitivamente, $\mathcal{H}$ é muito próximo a $H_0 := -\frac{\hbar^2}{2\,m}\triangle$ para $|x|$ grande, assim espera-se que ψ se comporte como uma partícula livre longe da origem.

Definição 2.28. Denominamos $\mathcal{H}_b$ o fecho do espaço gerado pelos autovetores de $\mathcal{H}$.

Sendo assim, $\mathcal{H}_b^{\perp}$ denota os estados que são ortogonais a este subespaço $\mathcal{H}_b$. Estes dois subespaços são invariantes pela ação do operador linear $\mathbf{H}$.

Exemplo 2.14. Suponha que V seja da forma acima e seja ψ_0 uma autofunção de $\mathcal{H}$, associada ao autovalor λ, com $||\psi_0||_{L^2(\mathbb{R})} = 1$. Neste caso a solução $\psi_t, t \geq 0$, da equação (1) é dada por $\psi(x,t) = e^{-\frac{i\lambda t}{\hbar}}\psi_0$. Para qualquer intervalo limitado $I = (-R, R) \subset \mathbb{R}$ temos

$$P(t, I, \psi_0) = \int_I |\psi_t(x)|^2 dx = \int_I e^{-\frac{i\lambda t}{\hbar}}\psi_0(x)\overline{e^{-\frac{i\lambda t}{\hbar}}\psi_0(x)} dx = \int_I |\psi_0(x)|^2 dx \leq ||\psi_0||^2.$$

Assim, $\lim_{t\to+\infty} \int_I |\psi_t(x)|^2 dx = \int_I |\psi_0(x)|^2 dx > 0$, para algum I grande e fixo. Desta forma, com o decorrer do tempo, a probabilidade de encontrar a partícula numa fixada região limitada é positiva.

Por outro lado se $\psi_0 \in \mathcal{H}_b^{\perp}$ é possivel provar que para qualquer intervalo finito I temos que $\lim_{t\to+\infty} \int_I |\psi_t(x)|^2 dx = 0$ (ver Remark após a definição 2.29).

Ou seja, a probabilidade da partícula quântica ficar na região limitada I vai a zero com o decorrer do tempo.

Assim, é natural de chamar os estados ψ_0 em $\mathcal{H}_b$ de limitados e os em $\mathcal{H}_b^{\perp}$ de ilimitados.

O exemplo anterior justifica a seguinte definição:

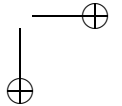
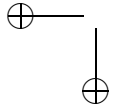
Definição 2.29. Um estado de espalhamento é uma solução de (1) com $\psi_0 \in \mathcal{H}_b^{\perp}$.

Vamos primeiro trabalhar um pouco com o caso degenerado $\mathcal{H} = H_0$.

Proposição 2.45. *Sejam $\psi_0 \in L^2(\mathbb{R})$, ψ solução de (1) acima com $\mathcal{H} = H_0$ e $I \subset \mathbb{R}$ intervalo limitado. Então* $\lim_{|t|\to+\infty} P(t, I, \psi_0) = 0$.

Demonstração. Usaremos aqui alguns resultados da seção 1.5.

Assuma sem perda de generalidade que $I = (-R, R)$. Suponhamos inicialmente que $\psi_0 \in C_c^{+\infty}(\mathbb{R})$, conforme a discussão da seção 6 do quantum 3, vale

$$\psi(x,t) = \left(\frac{2\pi i\hbar t}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{im|x-y|^2}{2\hbar t}} \psi_0(y) dy$$

Note que,

$$P(t,I,\psi_0)=\int_R^R|\psi(x,t)|^2dx=\left(\frac{2\pi\hbar|t|}{m}\right)^{-\frac{1}{2}}\int_{-R}^R\left|\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{im|x-y|^2}{2\hbar t}}\psi_0(y)dy\right|^2dx\leq$$
$$\left(\frac{2\pi\hbar|t|}{m}\right)^{-\frac{1}{2}}\int_{-R}^R\left(\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_0(y)|dy\right)^2dx\leq\left(\frac{2\pi\hbar|t|}{m}\right)^{-\frac{1}{2}}2R||\psi_0||^2_{L^1(\mathbb{R})}\overset{|t|\to+\infty}{\longrightarrow}0$$

Provamos assim o resultado para $\psi\in C_c^{+\infty}(\mathbb{R})$. O caso geral segue-se por um argumento de densidade.

Estamos interessados no comportamento de ψ_t, solução da equação de Schrodinger para $\mathcal{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+V(x)$, quando $t\to\pm\infty$. É natural perguntar se dado a condição inicial $\psi_0\in\mathcal{H}_b^\perp$, existe $\phi_0\in L^2(\mathbb{R})$ tal que

$$||\psi_t-e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}\phi_0||=||e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}\psi_0-e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}\phi_0||\overset{t\to\pm\infty}{\longrightarrow}0 \tag{2.95}$$

Este é chamado o problema da completitude assintótica; isto é, quando para todo $\psi_0\in\mathcal{H}_b^\perp$, existir $\phi_0\in L^2(\mathbb{R})$ como acima. Intuitivamente (2) nos diz que ψ_t se comporta como uma partícula livre (com condição inicial ϕ_0) para t (com módulo) bem grande.

Definição 2.30. O conjunto $\mathfrak{X}^+$ é o conjunto dos ψ_0 para os quais existe ϕ_0 tal que

$$\lim_{t\to\infty}||e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}\psi_0-e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}\phi_0||=0 \tag{2.96}$$

Definição 2.31. O conjunto $\mathfrak{X}^-$ é o conjunto dos ψ_0 para os quais existe ϕ_0 tal que

$$\lim_{t\to-\infty}||e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}}\psi_0-e^{-\frac{iH_0t}{\hbar}}\phi_0||=0 \tag{2.97}$$

Pode se mostrar que $\mathcal{H}_b^\perp=\mathfrak{X}^+\cap\mathfrak{X}^-$ (ver [183]).

Remark: Se $\psi_0\in\mathfrak{X}^+$ então pela Proposição 2.47 vale que

$$\lim_{t\to\infty}\int_{-R}^R|\psi_t(x)|^2\,dx=0,$$

e se $\psi_0\in\mathcal{H}_b^\perp$ temos $\psi_0\in\mathfrak{X}^+$. Então, pela igualdade $\mathcal{H}_b^\perp=\mathfrak{X}^+\cap\mathfrak{X}^-$ concluímos o que afirmamos anteriormente.

Proposição 2.46. *Se $\psi_0 \in \mathfrak{X}^+$, então se $I = (-R, R) \subset \mathbb{R}$ temos que*

$$\lim_{t\to\infty} P(t, I, \psi_0) = \int_I |\psi_t(x)|^2 dx = 0.$$

Demonstração. Se $\psi_0 \in \mathfrak{X}^+$, então, pela desigualdade triangular

$$\limsup_{t\to\infty} \int_I |\psi_t(x)|^2 dx = \limsup_{t\to\infty} \int_I |e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} \psi_0\,(x)|^2\, dx \leq$$

$$\limsup_{t\to\infty} \left(\int_I |\, e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} \psi_0 - e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \phi_0\,|^2\, dx\,)^{1/2} \;+ (\int_I |e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \phi_0\,|^2\, dx\,)^{1/2} \right)^2 \leq$$

$$\limsup_{t\to\infty} \left((\int |\, e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} \psi_0 - e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \phi_0\,|^2\, dx\,)^{1/2} \;+ (\int_I |e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \phi_0\,|^2\, dx\,)^{1/2} \right)^2.$$

O limite da expressão do primeiro termo acima vai a zero pela hipótese de $\psi_0 \in \mathfrak{X}^+$ e o segundo termo vai a zero pela proposição anterior.

A propriedade análoga vale para $\psi_0 \in \mathfrak{X}^-$.

Queremos introduzir agora os operadores de onda associados a $\mathcal{H}$ e H_0. Para justificar a definição observamos que

$$\lim_{t\to\pm\infty} ||e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} \psi_0 - e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \phi_0|| = 0 \quad \overset{\text{como } e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} \text{ é isometria}}{\Longleftrightarrow} \quad \lim_{t\to\pm\infty} ||\psi_0 - e^{\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \phi_0|| = 0$$

$$\Leftrightarrow \quad \psi_0 = \lim_{t\to\pm\infty} e^{\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \phi_0.$$

Vamos agora introduzir os operadores Ω^+ e Ω^-.

Definição 2.32. Definimos os operadores de onda associados a $\mathcal{H}$ e H_0, por

$$\Omega^{\pm}\phi = \lim_{t\to\pm\infty} e^{\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} \phi,$$

se o limite existir.

É fácil ver que $\Omega^{\pm}$ são isometrias. Os operadores Ω^+ e Ω^- estão bem definidos, se só se, existe completitude assintótica. Não provaremos aqui a existência (e bem definição) dos operadores $\Omega^{\pm}$ e o leitor interessado na questão pode consultar [156] [183].

O operador Ω^- associa assim de maneira natural o $\psi_0 \in \mathcal{H}_b^{\perp}$ e o $\phi_0 \in L^2(\mathbb{R})$ da completitude assintótica.

$D(\Omega^{\pm})$ denota o domínio de $\Omega^{\pm}$. Em geral $D(\Omega^{\pm}) \neq L^2(\mathbb{R})$ e a proposição seguinte nos dá um resultado mais preciso.

Proposição 2.47. *Imagem* $(\Omega^{\pm}) \subset \mathcal{H}_b^{\perp}$

Demonstração.

Sejam $\phi_0 \in L^1(\mathbb{R}) = \{\psi \text{ tal que } \int |\psi(x)| dx < \infty\}$ e assumamos que $\Omega^{\pm}\phi_0$ está bem definido. Seja $g \in \mathcal{H}_b$ tal que $\mathcal{H}g = \lambda g$. Então

$$< g, \Omega^{\pm}\phi_0 >= \lim_{t\to\pm\infty} < g, e^{\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}\phi_0 >= \lim_{t\to\pm\infty} < e^{-\frac{i\mathcal{H}t}{\hbar}} g, e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}\phi_0 >=$$
$$\lim_{t\to\pm\infty} < e^{-\frac{i\lambda t}{\hbar}} g, e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} >= \lim_{t\to\pm\infty} e^{-\frac{i\lambda t}{\hbar}} < g, e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}\phi_0 >$$

Ora,

$$e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}}\phi_0 = \left(\frac{2\pi i\hbar t}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{im|x-y|^2}{2\hbar t}}\phi_0(y)dy,$$

portanto,

$$| < g, e^{-iH_0 t}\phi_0 > | = \left| \left(\frac{2\pi i\hbar t}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} g(x) e^{\frac{im|x-y|^2}{2\hbar t}} \overline{\phi_0(y)} dydx \right| \leq$$
$$\left(\frac{2\pi\hbar|t|}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} |g(x)||\phi_0(y)|dydx = \left(\frac{2\pi\hbar|t|}{m}\right)^{-\frac{1}{2}} ||g||_{L^1}||\phi_0||_{L^1} \overset{t\to\pm\infty}{\longrightarrow} 0$$

Onde supomos $g, \phi_0 \in L^1(\mathbb{R})$.

$\Omega^{\pm}\phi_0$ está na imagem de $\Omega^{\pm}$. Portanto, todo elemento da imagem é ortogonal a $\mathcal{H}_b$.

Em [183] pode ser encontrada uma demonstração mais geral do teorema acima, isto é, sem assumir que $g, \phi_0 \in L^1(\mathbb{R})$.

Se para toda $\psi_0 \in \mathcal{H}_b^{\perp}$ existe $\phi_0 \in L^2(\mathbb{R})$ satisfazendo (2.88), então a imagem de $\Omega^{\pm} = \mathcal{H}_b^{\perp}$(detalhes podem ser encontrados em [183]).

□

Seja $\Omega^{\pm *}$ o operador adjunto de $\Omega^{\pm}$. Então, sejam quais forem $\phi, \psi \in \mathcal{L}^2$ vale que $< \phi, \psi >=< \Omega^{\pm}\phi, \Omega^{\pm}\psi >=< \phi, \Omega^{\pm *}\Omega^{\pm}\psi >$, ou seja $\Omega^{\pm *}\Omega^{\pm} = I$. Por outro lado $\Omega^{\pm}\Omega^{\pm *}$ é projeção sobre $D(\Omega^{\pm})$, uma vez que $\Omega^{\pm}\Omega^{\pm *}\Omega^{\pm}\Omega^{\pm *} = \Omega^{\pm} I \Omega^{\pm *} = \Omega^{\pm}\Omega^{\pm *}$.

Definição 2.33. O operador $S = (\Omega^+)^* \, \Omega^-$ é denominado de operador scattering (ou, de espalhamento).

Proposição 2.48. *Se assumirmos a propriedade da completitude assintótica, então o operador $\mathcal{H}$ é unitariamente equivalente ao operador H_0 em $\mathcal{H}_b^{\perp}$.*

Demonstração.

Vamos então supor que para todo $\psi_0 \in \mathcal{H}_b^{\perp}$ existe o correspondente $\phi_0 \in L^2(\mathbb{R})$ desejado.

Observe inicialmente que

$$e^{-\frac{it\mathcal{H}}{\hbar}}\Omega^{\pm}\psi = \lim_{s\to\pm\infty} e^{-\frac{it\mathcal{H}}{\hbar}} e^{\frac{is\mathcal{H}}{\hbar}} e^{-\frac{isH_0}{\hbar}}\psi =$$

$$\lim_{s\to\pm\infty} e^{\frac{i(s-t)\mathcal{H}}{\hbar}} e^{-\frac{isH_0}{\hbar}}\psi = \lim_{s\to\pm\infty} e^{\frac{is^*\mathcal{H}}{\hbar}} e^{-\frac{is^*H_0}{\hbar}} e^{-\frac{itH_0}{\hbar}}\psi =$$

$$\Omega^{\pm}\,(e^{-\frac{itH_0}{\hbar}}\psi\,) \Leftrightarrow e^{-\frac{it\mathcal{H}}{\hbar}}\Omega^{\pm} = \Omega^{\pm}e^{-\frac{itH_0}{\hbar}}.$$

Derivando a expressão acima em $t = 0$ obtemos $\mathcal{H}\Omega^{\pm} = \Omega^{\pm}H_0$, para finalizar a prova observe que $\Omega^{\pm *} = \Omega^{\pm -1}$ em $\mathcal{H}_b^{\perp}$.

Assim, temos que

$$\mathcal{H} = \Omega^{\pm}H_0(\Omega^{\pm})^*$$

em $\mathcal{H}_b^{\perp}$.

O resultado acima nos assegura que restrito sobre $\mathcal{H}_b^{\perp}$ os espectros dos operadores $\mathcal{H}$ e H_0 são os mesmos (podem ser identificados via a isometria Ω^{+}).

2.20 Exponencial de Operadores não limitados

Nesta seção vamos mostrar como proceder para definir o exponencial de um operador não limitado.

Proposição 2.49. *Seja $A : D(A) \to \mathcal{H}_2$ operador limitado, com $D(A)$ domínio denso em $\mathcal{H}_1$. Então A pode ser estentida a $A : \mathcal{H}_1 \to \mathcal{H}_2$, linear e limitada.*

Demonstração. Vamos definir $A\psi$ para $\psi \in \mathcal{H}_1 \setminus D(A)$. Como $D(A)$ é denso, há seqüência (ψ_n) em $D(A)$ com $\psi_n \to \psi$. Vamos definir $A(\psi)$ como $\lim_{n\to\infty} A(\psi_n)$.

Primeiro vamos garantir que tal limite existe. Espaços de Hilbert são sempre completos por natureza, bastando-nos mostrar que $(A\psi_n)$ é seqüência de Cauchy.

Seja $\varepsilon > 0$. Como (ψ_n) converge, é de Cauchy. Existe N tal que $||\psi_n - \psi_m|| < \frac{\varepsilon}{||A||}$ para $n, m > N$. Então se $n, m > N$

$$||A\psi_n - A\psi|| \leq ||A||||\psi_n - \psi|| < ||A||\frac{\varepsilon}{||A||} = \varepsilon$$

o que demonstra que $A\psi = \lim A\psi_n$ existe.

Precisamos garantir que $A\psi$ independa da seqüência, ou seja, que se $\varphi_n \to \psi$ então $A\varphi_n \to A\psi = \lim_{n\to\infty} A\psi_n$.

Seja $\varepsilon > 0$. Então, existe N_1 tal que $||A\psi_n - A\psi|| < \frac{\varepsilon}{2}$ para $n > N_1$. Existe também N_2 tal que $||\varphi_n - \psi|| < \frac{\varepsilon}{2||A||}$ para $n > N_2$. Então $||A\varphi_n - A\psi|| < ||A||||\varphi_n - \psi|| < ||A||\frac{\varepsilon}{2||A||} = \frac{\varepsilon}{2}$. Usando a desigualdade triangular, obtemos

$$||A\varphi_n - A\psi|| \leq ||A\varphi_n - A\psi_n|| + ||A\psi_n - A\psi|| < \frac{\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon}{2} = \varepsilon$$

sempre que $n > N = N_1 + N_2$. Isso mostra que o limite $A\psi$ independe da seqüência tomada em sua definição, e portanto esta está bem posta. A definição de $A\psi$ como limite de seqüências pode ser feita também para $\psi \in D(A)$ (com uma seqüência constante) e coincide com a original.

Sejam agora (ψ_n) e (φ_n) seqüências em $D(A)$, com $\psi_n \to \psi$ e $\varphi_n \to \varphi$. Então $a\psi_n + b\varphi_n \to a\psi + b\varphi$.

$$A(a\psi + b\varphi) = \lim A(a\psi_n + b\varphi_n) = \lim aA\psi_n + bA\varphi_n = aA\psi + bA\varphi$$

o que mostra que A é linear e é limitado. De fato, para $\psi_n \to \psi$

$$||A\psi|| \leq ||A\psi - A\psi_n|| + ||A\psi_n|| \leq ||A\psi - A\psi_n|| + ||A||||\psi_n||$$

Se $n \to \infty$, $||A\psi - A\psi_n|| \to 0$ e $||\psi_n|| \to ||\psi||$, e portanto

$$||A\,\psi|| \leq ||A||||\psi||$$

mostrando que a extensão é limitada (e que sua norma coincide com a norma original).

Lema 2.50. *(Lema de [156] página 20) Seja $A : D(A) \to \mathcal{H}$ operador autoadjunto e $\psi \in \mathbb{C}$, $Im(z) \neq 0$. Então o operador $A - z$ tem inversa $(A - z\,I)^{-1} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$. Tal inversa é limitada, valendo $||(A - z\,I)^{-1}|| \leq |Im(z)|^{-1}$.*

Demonstração. Seja $\psi \in D(A)$. Calculamos

$$\begin{aligned} ||(A - z\,I)\psi||^2 &= \langle (A - z\,I)\psi, (A - z\,I)\psi \rangle \\ &= \langle A\psi, A\psi \rangle + \langle A\psi, -z\psi \rangle + \langle -z\psi, A\psi \rangle + \langle -z\psi, -z\psi \rangle \\ &= ||A\psi||^2 - 2Re(z)\langle \psi, A\psi \rangle + |z|^2||\psi||^2 \end{aligned}$$

pois $\langle A\psi, -z\psi \rangle = -\bar{z}\langle A\psi, \psi \rangle = -\bar{z}\langle \psi, A\psi \rangle$ e $z + \bar{z} = 2Re(z)$.

Usando a desigualdade de Cauchy-Schwarz $|\langle \psi, \varphi \rangle| \leq ||\psi||||\varphi||$ e a identidade $|z|^2 = |Re(z)|^2 + |Im(z)|^2$, temos

$$\begin{aligned} ||(A - z\,I)\psi||^2 &\geq ||A\psi||^2 - 2|Re(z)|||\psi||||A\psi|| + |Re(z)|^2||\psi||^2 + |Im(z)|^2||\psi||^2 \\ &= (||A\psi|| - |Re(z)|||\psi||)^2 + |Im(z)|^2||\psi||^2 \\ &\geq |Im(z)|^2||\psi||^2 \end{aligned}$$

Isso implica que $(A - z\,I)(\psi) = 0$ somente para $\psi = 0$; Assim, $A - z\,I$ é injetiva. Podemos definir um operador

$$(A - z\,I)^{-1} : Im(A - z\,I) \to \mathcal{H}$$

com $(A - z\,I)^{-1}(A - z\,I) = id_{D(A)}$ e $(A - z\,I)^{-1}(A - z\,I) = id_{Im(A - z\,I)}$. (Não confundir $Im(A - z\,I)$, a imagem de um operador linear, com $Im(z)$, a parte imaginária de um número complexo.) Mostraremos que $Im(A - z\,I)$ é denso em $\mathcal{H}$. Seja $\varphi \in Im(A - z\,I)^{\perp}$. Temos então $\langle \varphi, (A - z\,I)\psi \rangle = 0$ para todo $\psi \in \mathcal{H}$. Ora,

$$0 = \langle \varphi, (A - z\,I)\psi \rangle = \langle \varphi, A\psi \rangle + \langle \varphi, -z\psi \rangle =$$

$$\langle A\varphi\psi\rangle + \langle -\bar{z}\varphi, \psi\rangle = \langle (A-\bar{z})\varphi, \psi\rangle$$

para todo $\psi \in \mathcal{H}$ e portanto $\varphi = 0$. Assim, $(ImA - zI)^{\perp} = \{0\}$ e portanto $Im(\bar{A} - z\,I) = Im(A - z\,I)^{\perp\perp} = \{0\}^{\perp} = \mathcal{H}$, demostrando que $Im(A - z\,I)$ é denso em $\mathcal{H}$.

O operador $(A - z\,I)^{-1} : Im(A - z\,I) \to \mathcal{H}$ é limitado. De fato, para todo $\varphi = (A - z\,I)\psi \in Im(A - z\,I)$ temos

$$\begin{aligned} ||(A - z\,I)\psi|| &\geq |Imz|||\psi|| \\ ||\varphi|| &\geq |Imz|||(A - z\,I)^{-1}\varphi|| \\ ||(A - z\,I)^{-1}\varphi|| &\leq |Imz|^{-1}||\varphi|| \end{aligned}$$

donde segue $||(A - z\,I)^{-1}|| \leq |Imz|^{-1}$.

A partir do que vimos acima garantimos a existencia de uma inversa $(A - z\,I)^{-1} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, com a mesma norma $|Imz|^{-1}$.

Proposição 2.51. *Seja $A : D(A) \subseteq \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ operador autoadjunto e ilimitado. Então para $\lambda > 0$ os operadores*

$$A_\lambda := \frac{1}{2}\lambda^2[(A + i\lambda)^{-1} + (A - i\lambda)^{-1}]$$

são autoadjuntos e limitados, com $\lim_{\lambda\to\infty} A_\lambda\psi = A\psi$ para todo $\psi \in D(A^2) \subseteq D(A)$.

Além disso, $\lim_{\lambda\to\infty} e^{iA_\lambda}\psi$ existe para todo $\psi \in D(A^2)$, e definimos $e^{iA}\psi$ como sendo esse limite.

Observação 2.3. Devemos ter $D(A) \subsetneq \mathcal{H}$, pois um operador autoadjunto definido em todo $\mathcal{H}$ seria necessariamente limitado (ver [345] página 195). Este resultado é consequencia imediata do Teorema do gráfico fechado. Seja $T : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ autoadjunto e $\phi_n \to \phi$, $T(\phi_n) \to \psi$ em $\mathcal{H}$. Então, para todo $\theta \in \mathcal{H}$:

$$< T\,\phi,\,\theta >=< \phi\,,\,T\,\theta >= \lim_{n\to\infty} < \phi_n,\,T\,\theta >=$$

$$\lim_{n\to\infty} < T\,\phi_n,\,\theta >=< \psi\,,\,\theta > .$$

Ou seja, $T(\phi) = \psi$.

Demonstração. Segundo o Lema 2.50, $(A \pm i\lambda)^{-1}$ está definido em todo $\mathcal{H}$, e vale $||(A \pm i\lambda)^{-1}|| \leq \lambda^{-1}$. Então

$$||A_\lambda\psi|| = \frac{1}{2}\lambda^2||[(A+i\lambda)^{-1}+(A-i\lambda)^{-1}]\psi|| \leq \frac{1}{2}\lambda^2[\lambda^{-1}+\lambda^{-1}]||\psi|| = \lambda||\psi||$$

e portanto A_λ é limitado, $||A_\lambda|| \leq \lambda$.

Consideremos sempre $\psi \in D(A^2) \subseteq D(A)$, que é o ambiente no qual as contas seguintes fazem sentido.

$$\begin{aligned}
[\lambda^2(A+i\lambda)^{-1} - A]\psi &= (A+i\lambda)^{-1}[\lambda^2 - A(A+i\lambda)]\psi \\
&= (A+i\lambda)^{-1}[\lambda^2 - A^2 - i\lambda A]\psi \\
&= (A+i\lambda)^{-1}[\lambda(\lambda - iA) - A^2]\psi \\
&= (A+i\lambda)^{-1}[-i\lambda(A+i\lambda) - A^2]\psi \\
&= [-i\lambda - (A+i\lambda)^{-1}A^2]\psi
\end{aligned}$$

Analogamente obtemos

$$[\lambda^2(A-i\lambda)^{-1} - A]\psi = [i\lambda - (A-i\lambda)^{-1}A^2]\psi$$

Unindo,

$$\begin{aligned}
||(A_\lambda - A)\psi|| &= \tfrac{1}{2}||\,[\lambda^2(A+i\lambda)^{-1} + \lambda^2\,(A-i\lambda)^{-1} - 2A]\ \psi\ || \\
&= \tfrac{1}{2}||\,[\lambda^2(A+i\lambda)^{-1} - A + \lambda^2(A-i\lambda)^{-1} - A]\ \psi\,|| \\
&= \tfrac{1}{2}||\,[-i\lambda - A^2(A+i\lambda)^{-1} + i\lambda - A^2(A-i\lambda)^{-1}\ ]\,\psi\,|| \\
&= \tfrac{1}{2}||\,[-(A+i\lambda)^{-1}A^2 - (A-i\lambda)^{-1}A^2]\ \psi\,|| \\
&\leq \tfrac{1}{\lambda}||\,A^2\psi\,||
\end{aligned}$$

Daí $\lim_{\lambda\to\infty} ||(A_\lambda - A)\psi|| = \lim_{\lambda\to\infty} \frac{1}{\lambda}||A^2\psi|| = 0$ para todo $\psi \in D(A^2)$, como queríamos.

Além disso, A_λ é autoadjunto. Com efeito, sejam ψ e ϕ em $\mathcal{H}$. Vimos que existem $\tilde{\psi}$ e $\tilde{\phi}$ com $(A-i\lambda)\tilde{\psi} = \psi$ e $(A+i\lambda)\tilde{\phi} = \phi$. Então

$$\begin{aligned}
\langle\psi, (A+i\lambda)^{-1}\phi\rangle &= \langle(A-i\lambda)\tilde{\psi}, (A+i\lambda)^{-1}(A+i\lambda)\tilde{\phi}\rangle \\
&= \langle(A-i\lambda)\tilde{\psi}, \tilde{\phi}\rangle \\
&= \langle\tilde{\psi}, (A+i\lambda)\tilde{\phi}\rangle \\
&= \langle(A-i\lambda)^{-1}(A-i\lambda)\tilde{\psi}, (A+i\lambda)\tilde{\phi}\rangle \\
&= \langle(A-i\lambda)^{-1}\psi, \phi\rangle
\end{aligned}$$

e portanto $(A+i\lambda)^{-1\,*} = (A-i\lambda)^{-1}$ e vice-versa. Assim,

$$A_\lambda^* = \frac{1}{2}\lambda^2[(A+i\lambda)^{-1\,*} + (A-i\lambda)^{-1\,*}] = \frac{1}{2}\lambda^2[(A-i\lambda)^{-1} + (A+i\lambda)^{-1}] = A_\lambda$$

Pela autoadjuntividade de A_λ, temos $||e^{iA_\lambda}\psi|| = ||\psi||$.

A derivada para operadores mantém algumas propriedades da derivada usual, como a linearidade, a derivada de uma exponencial, a regra do produto e o Teorema Fundamental do Cálculo. Não demonstraremos tais fatos.

Vamos mostrar agora que $\{e^{iA_\lambda}\}_{\lambda>0}$ (operadores bem definidos visto que A_λ é limitado) é uma família de Cauchy com $\lambda \to \infty$, ou seja, $||(e^{iA_{\lambda'}} - e^{iA_\lambda})\psi|| \to 0$ quando $\lambda', \lambda \to \infty$.

Repare que A_λ, $A_{\lambda'}$, e^{iA_λ} e $e^{iA'_\lambda}$ comutam.

Temos que

$$e^{iA_{\lambda'}} - e^{iA_\lambda} = \int_0^1 \frac{\partial}{\partial s}\big(e^{isA'_\lambda} e^{(1-s)\,i\,A_\lambda}\big)ds$$

Juntando as expressões acima, obtemos, para $\psi \in D(A^2)$

$$\begin{array}{rcl} ||e^{iA_{\lambda'}}\psi - e^{iA_\lambda}\psi|| & = & ||\int_0^1 \frac{\partial}{\partial s}\big(e^{isA_{\lambda'}} e^{(1-s)\,i\,A_\lambda}\big)\psi ds|| \\ & = & ||\int_0^1 e^{isA'_\lambda} e^{i(1-s)A_\lambda}\ i(A_{\lambda'} - A_\lambda)\psi ds|| \\ & \leq & \int_0^1 ||e^{isA'_\lambda} e^{i(1-s)A_\lambda}\ i(A_{\lambda'} - A_\lambda)\psi|| ds \\ & = & \int_0^1 ||(A_{\lambda'} - A_\lambda)\psi|| ds \\ & = & ||(A_{\lambda'} - A_\lambda)\psi|| \end{array}$$

Como $\{A_\lambda(\psi)\}$ é família de Cauchy, segue que $\{e^{iA_\lambda}(\psi)\}$ é família de Cauchy. Isso nos permite definir, para $\psi \in D(A^2)$,

$$e^{iA}\psi := \lim_{\lambda\to\infty} e^{iA_\lambda}\psi$$

Como $||e^{iA_\lambda}\psi|| = ||\psi||$ para todo $\lambda > 0$ e $\psi \in D(A^2)$, temos $||e^{iA}\psi|| = ||\psi||$ para todo $\psi \in D(A^2)$, e portanto e^{iA} é limitada. Como $D(A^2)$ é denso, podemos usar a Proposição 2.49 para obter $e^{iA} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$.

Bibliografia

[1] N. Akhiezer and I. Glasman, Theory of Linear Operators in Hilber Space, Dover.

[2] M. Aguiar, Tópicos de Mecânica Clássica, Editora Livraria da Física, 2011.

[3] S. Albeverio, N. Cangiotti and S. Mazzucchi, A rigorous mathematical construction of Feynman path integrals for the Schrodinger equation with magnetic field, Arxiv (2019)

[4] R. Alicki and R. Koslov, Introduction to Quantum Thermodynamics: History and Prospects, arXiv (2019)

[5] M. Aguiar, O Limite semiclássico da Mecânica Quântica, Notas de aula,

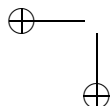
http://www.ifi.unicamp.br/∼aguiar/Notas/notas.html

[6] S. Albeverio, Mathematical Theory of Feynman Path Integrals : An Introduction, Springer Verlag.

[7] A. O. de Almeida, Sistemas Hamiltonianos: caos e quantização, Editora Unicamp, 1993.

[8] T. Aoki, S. Kanemitsu, M. Nakahara and Y. Ohno, Zeta Functions, Topology and Quantum Physics, Springer (2005)

[9] V. Arnold, Mathematical Methods of Classical Mechanics, Springer Verlag, 2010.

[10] B. Amaral, A. Baraviera e M. Terra Cunha, Mecânica Quântica para matemáticos em formação, 28 Colóquio Brasileiro de Matemática

[11] M. Amy and V. Gheorghiu. staq - A full-stack quantum processing toolkit, ArXiv (2019)

[12] N. Anantharaman, Entropie et localisation des fonctions propres, Document de Synthese, Ecole Normale Superieure de Lyon (2006)

[13] N. Anantharaman and A. Backer, Quantum ergodicity and beyond (with a gallery of pictures), IAMP News Bulletin, April 2013, 10-28.

[14] A. Arai, Analysis on Fock Spaces and Mathematical Theory of Quantum Fields, World Scient (2017)

[15] V. Arnold, Mathematical Methods of Classical Mechanics, Springer Verlag (1991)

[16] V. Arnold and A . Avez, Ergodic Problems of Classical Mechanics,

[17] S. Attal, Lectures in QUANTUM NOISE THEORY

http://math.univ-lyon1.fr/ attal/chapters.html

[18] G. Auletta, M. Fortunato, and G. Parisi, Quantum Mechanics Cambridge University Press, 2009.

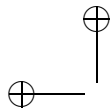
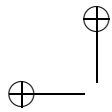
[19] B. Baaquie, Path Integrals and Hamiltonians, Cambridge Press, 2014

[20] A. V. Balakrishnan, Applied Functional Analysis. Springer-Verlag, 1976.

[21] L. Ballentine, Quantum Mechanics, World Scientific Press, 1998.

[22] A. Baraviera, Introdução à Mecânica Quântica, Primeiro Coloq Mat. Reg. Sul (2010)

[23] A. Baraviera, C. F. Lardizabal, A. O. Lopes e M. Terra Cunha, A dynamical point of view of quantum information: entropy and pressure. Dynamics, games and science. II, 81-122, Springer Proc. Math., 2, Springer, Heidelberg, 2011.

[24] A. Baraviera, C. F. Lardizabal, A. O. Lopes e M. Terra Cunha, A dynamical point of view of quantum information: discrete Wigner measures. Dynamics, games and science. II, 161-185, Springer Proc. Math., 2, Springer, Heidelberg, 2011.

[25] A. Baraviera, C. F. Lardizabal, A. O. Lopes e M. Terra Cunha, A Thermodynamic Formalism for density matrices in Quantum Information, Applied Mathematics Research Express, Vol. 2010, No. 1, pp. 63-118 (2010)

[26] A. T. Baraviera, L. M. Cioletti, A. Lopes, J. Mohr, R. R. Souza, On the general one dimensional XY Model: positive and zero temperature, selection and non-selection, Reviews in Math. Physics, VOl 23, N. 10, pp 1063-1113 (2011)

[27] R. Bartle, The Elements of Real Analysis, Wiley, 1964.

[28] R. Bartle, The Elements of Integration, Wiley, 1964

[29] G. Baumann, Mathematica for Theoretical Physics: Electrodynamics, Quantum Mechanics, General Relativity, and Fractals, Springer

[30] Convergence rates for the quantum central limit theorem S. Becker, N. Datta, L. Lami and C. Rouze, ArXiv (2019)

[31] C. M. Bender and S. A. Orszag, Advanced Mathematical Methods for Scientists and Engineers I, Springer Verlag (1999)

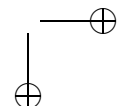
[32] A, V. Belinsky and A. K. Zhukovsky, Nonlocality in Quantum Theory, Arxiv (2015)

[33] F. Benatti, Dynamics, Information and Complexity in Quantum Systems. Springer, 2009.

[34] C. M. Bender, D. C. Brody and M. P. Muller Hamiltonian for the zeros of the Riemann zeta function, Arxiv (2016)

[35] G. Benenti, G. Casati and G. Strini, Principles of Quantum Computation and Information, Vol I and II, World scientic, 2007

[36] T. Benoist, M. Fraas, Y. Pautrat, and C. Pellegrini, Invariant measure for quantum trajectories, Prob. Theory and Related Fields, 174 (2019), no. 1-2, 307-334

[37] J. Bernard, Iterates of Qunatum operations, ArXiv (2019)

[38] E. DiBenedetto and A. Friedman, Hölder estimates for nonlinear degenerate parabolic sytems, Journal für die reine und angewandte Mathematik, 357, 1-22 (1984)

[39] C. Beny and F. Ricther, Algebraic approach to quantum theory: a finite-dimensional guide, Arxiv (2015)

[40] F. A. Berezin and M.A. Shubin, The Schrodinger equation, Kluwer Press

[41] M. V. Berry and J. P. Keating, $H = x\,p$ and the Riemann zeros. In Supersymmetry and Trace Formulae: Chaos and Disorder, edited by I.V. Lerner et al. Kluwer Academic, New York, (1999).

[42] R. Bissacot and L. Cioletti, Introdução às medidas de Gibbs, Notes USP (2013)

[43] J. Blank, P. Exner, Miloslav Havlicek, Hilbert Space Operators in Quantum Physics, Springer Verlag

[44] P. Blanchard, Mathematical Methods in Physics: Distributions, Hilbert Space Operators, Variational Methods, and Applications in Quantum Physics, (2015) Springer

[45] E. Bogomolny and M. Carioli, Quantum maps of geodesic flows on surfaces of constant negative curvature, IV International Conference on PATH INTEGRALS FROM meV TO MeV, Tutzing May, (1992) 18-21.

[46] A. Bovier. Statistical Mechanics of Disordered Systems. A Mathematical Perspective. Cambridge University Press (2006).

[47] A. Bohm, A. Mostafazadeh, H. Koisumi, K. Niu and J. Zwangizer, The Geometric Phase in Quantum Systems, Springer verlag (2003)

[48] J. Brasil, A. Lopes, J. K. Mengue and Carlos G. Moreira, Quantum Spin probabilities at positive temperature are Holder Gibbs probabilities, a ser publicado em Comm. in Contemporary Math.

[49] J. E. Brasil, J. Knorst, and Artur O. Lopes, Thermodynamic Formalism for Quantum Channels: Entropy, Pressure and Gibbs Channels, arXiv 2019

[50] J. E. Brasil, J. Knorst and Artur O. Lopes, Lyapunov exponents for Quantum Channels: an entropy formula and generic properties, arXiv 2019

[51] J. Brasil, Probabilidades de spin quantico em temperatura positiva, Master dissertation, Pos. Grad. Matematica, UFRGS (2018)

[52] O. Bratteli and D. Robinson, Operator algebras and quantum statistical mechanics, vols. 1 e 2. Second edition. Springer-Verlag, 1997.

[53] E. Butkov, Mathematical Physics, Academic Press, Addison-Wesley, 1968.

[54] I. Bengstsson and K. Zyczkowski, Geometry of Quantum states, Cambridge Press (2006)

[55] M. Brack and R. Bhaduri, Semiclassical Physics, Addison Wesley.

[56] H. Brezis, Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations, Springer Verlag, (2011)

[57] A. Buchleitner, C. Viviescas and M. Tiersch, Entanglement and Decoherence, Springer Verlag

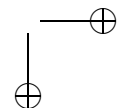
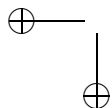
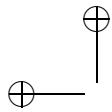
[58] M. do Carmo, Geometria Diferencial de Curvas e Superfícies, Textos Universitários, SBM, (2006)

[59] M. do Carmo, Geometria Riemanniana, Projeto Euclides, IMPA

[60] S. L. Carvalho, L. F. Guidi C. F. Lardizabal, Site recurrence of open and unitary quantum walks on the line, Quantum Information Processing 16:17 (2017)

[61] J. Ossorio-Castillo and J. M. Tornero, Quantum computing from a mathematical perspective: a description of the quantum circuit model, arXiv (2018)

[62] G. Castro, A. Lopes and G. Mantovani, Haar systems, KMS states on von Neumann algebras and C^*-algebras on dynamically defined groupoids and Noncommutative Integration, preprint (2017)

[63] A. A. de Castro Junior, Funções de Operador e o estudo do Espectro, XXIX Colóquio Brasileiro de Matemática, IMPA, Rio de janeiro (2013)

[64] A. M. Cetto, L. de la Pena and A. Valdes-Hernandez, Specificity of the Schrödinger equation, Quantum Studies: Mathematics and Foundations

[65] Mou-Hsiung Chang, Quantum Stochastics, Cambridge Press (2015)

[66] Yi-Zen Chu, Analytical Methods in Physics, Arxiv (2017)

[67] L. Cioletti and A. O. Lopes, Interactions, Specifications, DLR probabilities and the Ruelle Operator in the One-Dimensional Lattice, Discrete and Cont. Dyn. Syst. - Series A, Vol 37, Number 12, 6139 – 6152 (2017)

[68] L. Cycon, R. G. Froese, W. Kirsch and B. Simon, Schrodinger Operators, Springer Verlag (1987)

[69] M. Combescure and D. Robert, Coherent states and applications in mathematical physics, Springer (2012)

[70] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloe, Waves and particles. Introduction to the fundamental ideas of Quantum Mechanics, 1992

[71] A. Connes, Trace formula in noncommutative geometry and the zeros of the Riemann zeta function. Selecta Mathematica, New Series 5, 29-106 (1999).

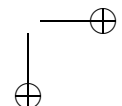
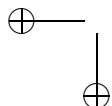
[72] A. Connes, Sur la theorie non commutative de l'integration, Lect. Notes in Math, vol 725, Springer 19-143 (1979)

[73] A. Connes and M. Marcolli, Noncommutative Geometry, Quantum Fields and Motives, AMS - Hindustan Book Agency. (2008)

[74] A. Connes, Noncommutative Geometry. San Diego: Academic Press (1994).

[75] G. Contreras, R. Iturriaga, Global minimizers of autonomous Lagrangians, 22° Colóquio Brasileiro de Matemática, IMPA, 1999.

[76] J. Conway, Functional Analysis, Springer

[77] J. Conway, Functions of one Complex Variable, Springer Verlag, (1978).

[78] D.S.F. Crothers, Semiclassical Dynamics and Relaxation, Springer Verlag

[79] T. L Curtright, D. Fairlie and C. Zachos, A Concise Treatise on Quantum Mechanics in Phase Space, World Scientific (2014)

[80] D. Damanik, Schrodinger Operators with dynamically defined potentials, survey (2014)

[81] I. Daubechies, Continuity statements and counterintuitive examples in connection with Weyl quantization, J. Math. Phys. 24(6), 1453–1461 (1983)

[82] F. David, The Formalisms of Quantum Mechanics, Springer Verlag (2015) a

[83] E. Davies, Spectral Theory and Differential operators, Cambridge Press (1995)

[84] S. De Bièvre, Quantum chaos: a brief visit, Contemp. Math., 289, pp 161-218, (2001)

[85] M. de Gosson, Sympletic Geometry and Quantum Mechanics. Ed. Birkhauser, 2006

[86] M. de Gosson, Quantum Harmonic Analysis of the Density Matrix: Basics, Arxiv (2017)

[87] M. de Gosson, The Wigner Transform, World Scientific (2017)

[88] M. de Gosson, Emergence of the Quantum from the Classical: Mathematical Aspects of Quantum Processes, World Scientific (2018)

[89] M. de Gosson, A Geometric Picture of the Wave Function: Fermi's Trick, Arxiv (2012)

[90] Y. C. de Verdiere, Methods semi-classiques et Theorie Spectrale, Inst. Fourier, https://www-fourier.ujf-grenoble.fr/~ycolver/All-Articles/93b.pdf

[91] Y. C. de Verdiere, Ergodicite et fonctions propres du Laplacien. Comm. Math. Phys. 102 no.3 497-502 (1985)

[92] L. de la Pena, A. M. Cetto, A. Valdes-Hernandez, The Emerging Quantum. The Physics Behind Quantum Mechanics, Springer (2015)

[93] E. de Farias and W. de Melo, Mathematical aspects of Quantum Field Theory, Pub. MAt. - IMPA

[94] G, DellAntonio Lectures on the Mathematics of Quantum Mechanics I, Atlantis Press (2015)

[95] G. DellAntonio, Lectures on the Mathematics of Quantum Mechanics II, Atlantis Press (2016)

[96] J. Dimock, Quantum Mechanics and Quantum Field Theory, Cambridge Theory. Commun. in Math. Phys., 244, 311-334, 2004

[97] C. Doering and A. O. Lopes, Equações Diferenciais Ordinárias, Col Mat Universitária, IMPA

[98] W. Dittrich and M. Reuter, Classical and Quantum Dynamics, Springer Verlag

[99] I. Dolgachev, Introduction to quantum physics for mathematicians, Lecture Notes Ann Harbor, 1996

[100] B. K. Driver, Lecture Notes, Univ. of San Diego, 2013

[101] N. Dunford and Schwartz, Linear Operators, Part 1, Intersience , New York (1958).

[102] N. Dunford and Schwartz, Linear Operators, Part 2, Intersience , New York (1958).

[103] D. Durr and S. Teufel, Bohmian Mechanics, Springer (2009)

[104] I. H. Duru, Solution of the Path Integral for the Quantum Pendulum, arXiv (2019)

[105] Yu. Egorov and M. Shubin, Foundations of the Classical Theory of Partial Differential Equations, Spinger Verlag (1998)

[106] R. S. Ellis, Entropy, Large Deviations, and Statistical Mechanics. Springer-Verlag, 1985.

[107] D. Evans and R. Hoegh-Rohn, Spectral properties of Positive Maps on C^*-Algebras, J. London Math. Soc. 17 (1978), 345-355.

[108] L. C. Evans, Towards a Quantum Analog of Weak KAM Theory. Commun. in Math. Phys., 244, 311-334, 2004

[109] L. C. Evans, Partial Differential Equations. AMS, 2000.

[110] L. C. Evans and M. Zworski, Lectures on semclassical analysis, Univ. Cal - Berkeley (2015)

[111] L. Evans and G. Gomes, Effective Hamiltonians and averaging for Hamiltonian Dynamics I, Arch. Rat. Mech Anal 157, 1-33 (2001)

[112] D. Evans and Y. Kawahigashi, Quantum symetries and operator algebras, Claredon Press, (1998)

[113] R. Exel and A. Lopes, C^*-algebras, approximately proper equivalence relations and thermodynamic formalism, Ergod. Theo. and Dynam. Sys., 24, 1051-1082 (2004)

[114] R. Exel and A. Lopes, C^*- Algebras and Thermodynamic Formalism, Sao Paulo Journal of Mathematical Sciences - (USP-Sao Paulo) Vol. 2 (1), 285-307 (2008)

[115] Y. Miyanishi, Notes on Feynman path integral-like methods of quantization on Riemannian manifolds, Arxiv (2015)

[116] L. Faddeev, Lectures on Quantum Mechanics for Students of Mathematics, AMS.

[117] M. Fannes, An introduction to quantum probability, Theoretical foundations of quantum information processing and communication, Lecture Notes in Phys., 787, 1-38 (2010)

[118] M. Fannes, Canonical Commutation and anticommutation relations, Quantum Prob. Comm, Vol XI, 171-198 (203)

[119] A. Fathi, Weak KAM Theorem and Lagrangian Dynamics, (2004), To appear.

[120] F. Faure, Semiclassical origin of the spectral gap for transfer operators of a partially expanding map, Nonlinearity 24, 1473-1498 (2011)

[121] J. Feagin, Quantum Methods with Mathematica, Springer Verlag (1994)

[122] P. Fernandez, Teoria da Medida, Proj. Euclides, IMPA

[123] V. Fedoryuk and P. Maslov, Semi-Classical approximation in Quantum Mechanics, Redidel (1981)

[124] A. Figalli, C. Klein, P. Markowich and C. Sparber, WKB analysis of Bohmian dynamics. Comm. Pure Appl. Math. 67, no. 4, 581–620 (2014).

[125] A. Fisher and A. O. Lopes, Exact bounds for the polynomial decay of correlation, 1/f noise and the central limit theorem for a non-Holder Potential, Nonlinearity, Vol 14, Number 5, pp 1071-1104 (2001).

[126] G. Folland, Quantum Field Theory, AMS

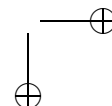
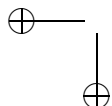
[127] G. B. Folland, Harmonic analysis on phase space, Princeton Press, (1989)

[128] A. C. C. van Enter, R. Fernandez R. and A. Sokal, Regularity properties and pathologies of position-space renormalization-group transformations: Scope and limitations of Gibbsian theory, Journ. of Stat. Phys., Vol 72, N 5/6, 1993 pp 879-1187.

[129] Y. Fukui and T. Horiguchi, Ground state properties of one-dimensional quantum chiral XY-model. Interdiscip. Inform. Sci., n.1, pp 57-66 (2002)

[130] B. Fritzsche, B. Kirstein, I.Ya. Roitberg, A.L. Sakhnovich, Continuous and discrete dynamical Schrodinger systems: explicit solutions, Arxiv (2017)

[131] G. Gallavotti, Statistical Mechanics: A Short Treatise, Springer Verlag

[132] A. Friedman, The asymptotic behaviour of the first eigenvalue of second order elliptic operators with a small parameter in the highest derivative, Indiana Univ. Math J. 22 (10) 1005-1015 (1973)

[133] A. Friedman, Stochastic differential equations and applications, Vol I, Academic Press

[134] A. Friedman, Stochastic differential equations and applications, Vol II, Academic Press

[135] M. Friedlin and A. Wentzell, Random perturbation of Dynamical Systems, Springer Verlag (1984)

[136] A. Galindo e P. Pascual, Quantum Mechanics, Springer Verlag, (1990)

[137] A. Gerolin, Un probleme Spectral inverse Semi-Classique, Document de Synthese, Inst. Fourier (2009)

[138] H. Girotti, An Introduction to the Functional Formulation of Quantum Mechanics, World Scientific Publishing (2013)

[139] Hans-Otto Georgii, Gibbs Measures and Phase Transitions, ed. De Gruyter

[140] D. Gillespie, A Quantum Mechanics Primer, John Wiley (1970)

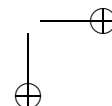
[141] Y. E. Gliklikh, Global and Stochastic Analysis with Applications to Mathematical Physics, Springer Verlag

[142] J. Gleason, The C^*-algebraic formalism of Quantum Mechanics,
http://www.math.uchicago.edu/ $m$ay/VIGRE/VIGRE2009/ REUPapers/Gleason.pdf

[143] J. Glimm and A. Jaffe, Quantum Physics: A Functional Integral Point of View, Springer Velag (1981)

[144] D. A. Gomes , A. O. Lopes and J. Mohr, Wigner measures and the semi-classical limit to the Aubry-Mather measure, Applied Mathematics Research Express, Volume 2012, Issue 2, 152-183 (2012)

[145] M. de Gosson, Sympletic geometry and Quantum Mechanics, Birkhauser (2006)

[146] K. Gottfried and T-M Yan, Quantum Mechanics: Fundamentals, Springer Verlag (2003)

[147] F. Guerra and L. Morato. Quantization of dynamical systems and stochastic control theory. Phys. Rev. D 27, 1774-1786, (1983)

[148] F. Guerra, Stochastic variational principles and quantum mechanics. Quantum nonlocality and the global structure of space time, Ann. Inst. H. Poincare Phys. Theor. 49, no. 3, 315–324 (1988)

[149] W. Greiner, Quantum Mechanics, an introduction, Springer Verlag

[150] D. Griffiths, An introduction to Quantum Mechanics, Prentice Hall.

[151] R. B. Griffiths, Quantum Theory, Cambridge Press (2003)

[152] R. B. Griffiths, Consistent Quantum Theory, Cambridge Press (2003)

[153] A. Grunbaum, L. Vinet and A. Zhedanov, Birth and death processes and quantum spin chains. J. Math. Phys 54 (2013), no. 6, 062101, 12 pp.

[154] V. Guillemin and S. Sternberg, Semi-Classical Analysis, International Press of Boston (2013)

[155] Martin C. Gutzwiller, Chaos in Classical and Quantum Mechanics, Springer (1990)

[156] S. Gustafson and I. Sigal, Mathematical concepts of Quantum Mechanics, Springer Verlag, (2000).

[157] B. C. Hall, Quantum theory for mathematicians, Springer Verlag (2013)

[158] M. J. W. Hall and M. Reginatto, Schrödinger equation from an exact uncertainty principle, J. Phys. A: Math. Gen. 35, 3289-3303, 2002

[159] P. Halmos, Finite dimensional vector spaces, Spinger Verlag

[160] K. Hannabuss, An Introduction to Quantum Theory, Oxford Press (1997)

[161] R. J. Harvey, Navier-Stokes analog of Quantum Mechanics, Phys. Rev. 152, 1115 (1966)

[162] C. Haupt, A Quantum Mechanical Bound for Space-Energy Cost with Respect to the Von Neumann Entropy, Arxiv (2016)

[163] J. Heading, An Introduction to Phase-Integral Methods, Dover Pub. (2013) Physical Review, 152(4):1115, 1966.

[164] S. Helgason, Topics in Harmonic Analysis on Homogeneous Spaces, Birkahauser, Kluwer, 1981.

[165] G. Helmberg, Introduction to Spectral Theory in Hilber Space, Dover, (1997)

[166] B. Helffer, Semi-classical analysis for the Schrodinger operator and applications, Springer Lect. Notes in Math., 1336 (1988).

[167] B. Helfer, Spectral theory and applications. An elementary introductory course. Bucarest Version (2010)

[168] B. Helffer and J. Sjostrand, Multiple Wells in the semi-classical limit I, Comm. in P.D.E 9, 337-408 (1984)

[169] K. Hepp, The Classical Limit for Quantum Mechanical Correlation Functions, Commun. math. Phys. 35, 265–277 (1974)

[170] A. Heslot, Quantum Mechanics as a classical theory. Phys. Rev. D (3) 31 (1985), no. 6, 1341–1348.

[171] E. Hewitt and K. Stromberg, Real and Abstract Analysis, Springer Verlag, (1965)

[172] F. Hofbauer, Examples for the non-uniqueness of the Gibbs states, *Trans. AMS* , (228), 133-141,(1977)

[173] D. Holcman and I. Kupka, Singular perturbation for the first eigenvalue and blow up analysis, Forum Math. 18, 445-518 (2006)

[174] D. Holcman and I. Kupka, Semi-classical limits of the first eigenfunction and concentration on the recurrent sets of a dynamical system, Forum Math. 23, 1-74 (2011)

[175] D. Holcman, Nonlinear pde with vector fields, J. Anal. Math 81, 111-137 (2000)

[176] C. S. Honig, Análise Funcional e o problema de Sturm Liouville , Ed. Edgard Blucher (1978)

[177] L.P. Horwitz, Fourier Transform on a Manifold, Arxiv (2019)

[178] J. Hounie, Introdução aos operadores Pseudo-diferenciais, 16. Coloq Bras. Matematica, IMPA, Rio de Janeiro

[179] M. Horodecki, P. Horodecki and R. Horodecki, Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions. Phys. Lett. A 223, no. 1-2, 1-8 (1996)

[180] M. Hall and M. Reginatto, Schrodinger equation from exact uncertinty principle, J. Phys. A: Math. Gen. 35 , pp 3289-3303 (2002)

[181] J. Helm, Classical vs. Quantum Decoherence, Dissertation, Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften der Technischen Universität Dresden (2011)

[182] P. Hislop and I. Sigal, Introduction to Spectral Theory, Springer

[183] R. Iorio, Tópicos na teoria da equação de Schrodinger, 16 Coloquio Brasileiro de Matematica, IMPA,

[184] C. Isham, Lectures on Quantum Theory. Imperial College Press, 1995.

[185] O. D. Johns, Analytical Mechanics for Relativity and Quantum Mechanics, Oxford Press

[186] G. Johnson and M. Lapidus, The Feynman Integral and Feynman's Operational Calculus, Oxford Press, (2002)

[187] P. Jorgensen and F. Tian, Non-Commutative Analysis, World Sic. (2017)

[188] T. Kato, Perturbation Theory for Linear Operators, Springer

[189] M. Kac, Integration in Function Spaces and some applications, ENS Pisa, 1980

[190] I. Karatzas and S. Shreve, Brownian Motion and Stochastic Calculus, Springer Verlag, 1991

[191] A. A. Kryukov, The classical and the quantum, ArXiv (2019)

[192] G. Kuperberg, A concise introduction to quantum probability, quantum mechanics, and quantum computation, preprint U. C. Davis (2007) https://www.math.ucdavis.edu/ greg/intro.pdf

[193] Y. Kifer, Principal eigenvalues, topological pressure, and stochastic stability of equilibrium states. Israel J. Math. 70 (1990), 1–47

[194] Y. Kifer, On the principal eigenvalue in a singular perturbation problem with hyperbolic limit points and circles. J. Differential Equations 37 (1980), 108–139

[195] U. Klein, What is the limit $\hbar \to \infty$ of quantum theory, Arxiv 2012

[196] J. Knorst, Semigrupos dinamicos quanticos a tempo continuo, Master dissertation, Pos. Grad. Matematica, UFRGS (2018)

[197] A.I. Komech, Lectures on Quantum Mechanics for mathematicians, arXiv (2019)

[198] E. Kreyzig, Introduction to Functional Analysis with Applications, Wiley

[199] A. Knauf and Y. Sinai, Classical nonintegrabilty, quantum chaos, Birkhauser (1997)

[200] S. Karlin and H. Taylor, A First course in Stochastic Processes, Academic Press.

[201] S. Karlin and H. Taylor, A Second course in Stochastic Processes, Academic Press.

[202] V. Kondratev and M. Shubin, Discreteness of spectrum for the Schrödinger operators on manifolds of bounded geometry. The Mazya anniversary collection, Vol. 2, 185-226, Oper. Theory Adv. Appl. (1999)

[203] V. N. Kolokoltsov, Semiclassical analysis for diffusions and stochastic processes, volume 1724, Lecture Notes in Mathematics. Springer, 2000.

[204] https://www.ibm.com/quantum-computing/

[205] C. Kubrusly, Spectral Theory of Operators on Hilbert Spaces, Birkhauser (2012)

[206] G. Landi, An Introduction to Noncommutative Spaces and Their Geometries, Springer Verlag (2014)

[207] K. Landsman Foundations of Quantum Theory, Springer Verlag (2017)

[208] N. Landsman, Mathematical Topics Between Classical and Quantum Mechanics, Springer Verlag (1998)

[209] N. Landsman, Lecture Notes on C^*-Algebras and Quantum Mechanics, Univ. of Amsterdam (1998)

[210] O. Lanford and D. Ruelle, Observables at infinity and states with short range correlation in statistical mechanics. Comm. Math. Phys. Vol. 13, 194-215, (1969).

[211] S. Lang, Algebra, Springer Verlag (2002)

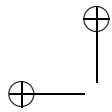
[212] S. Lang, Differential manifolds, Addison-Wesley Publishing Co (1972)

[213] S. Lang, Introduction to Differentiable Manifolds, Springer Verlag (2002)

[214] C. F. Lardizabal, Cadeias de Markov Clássicas e Quânticas, Dissertação de Mestrado, UFRGS (2006)

[215] C. F. Lardizabal, Open Quantum Random Walks and the Mean Hitting Time Formula. Quantum Information and Computation, Vol. 17, No. 1-2 (2017) 79-105.

[216] C. F. Lardizabal and R. Souza, Open Quantum Random Walks: ergodicity, hitting times, gambler's ruin and potential theory, Journal of Statistical Physics, 164: 1122-1156 (2016). doi

[217] C. F. Lardizabal and R. Souza, On a class of quantum channels, open random walks and recurrence, Journal of Statistical Physics, 159: 772-796 (2015).

[218] C. F. Lardizabal A quantization procedure based on completely positive maps and Markov operators. Quantum Information Processing, 12: 1033-1051 (2013).

[219] B. M. Levitan and I. Sargsjan, Sturm-Liouville and Dirac Operators, Kluwer (1991)

[220] H. Lieb and M. Loss, Analysis, AMS (2001)

[221] J. Leray, Analyse Lagrangienne en Mecanique Semi-classique, Cours au Coll. de France (1976-1977)

[222] E. L. Lima, Álgebra Linear, Col. Mat. Univ., IMPA, (2006)

[223] E. L. Lima, Espaços Métricos. Projeto Euclides, (1996).

[224] E. L. Lima, Curso de Análise, Vol I, Projeto Euclides, (1981).

[225] E. L. Lima, Curso de Análise, Vol II, Projeto Euclides, (1981).

[226] P. Lions and T. Paul, Sur les measures de Wigner, Rev. Mat. Iberoamerican 9 (3), 553-618 (1993)

[227] P. Lions, P. Papanicolau and G. Varadhan, Homogenization of Hamilton-Jacobi equations, unpublished, circa (1988)

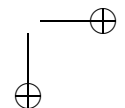
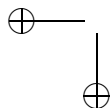
[228] A. O. Lopes, Introdução à Mecânica Clássica, Edusp (2006)

[229] A. O. Lopes, Tópicos de Mecânica Clássica, IMPA (2012)

[230] A. O. Lopes e S. Lopes, Introdução aos Processos Estocásticos para estudantes de Matemática (2012)

[231] A. O. Lopes, The Zeta Function, Non-Differentiability of Pressure and the Critical Exponent of Transition, *Advances in Mathematics*, Vol. 101, pp. 133-167, (1993).

[232] A. Lopes and P. Thieullen, Eigenfunctions of the Laplacian and associated Ruelle operator, *Nonlinearity*, Volume 21, Number 10, 2239-2254 (2008)

[233] A. Lopes, J. Mengue, J. Mohr and R. R. Souza, Entropy and Variational Principle for one-dimensional Lattice Systems with a general a-priori measure: positive and zero temperature, Erg. Theory and Dyn Syst. 35 (6), 1925–1961 (2015)

[234] A. O. Lopes and P. Thieullen, Transport and large deviations for Schrodinger operators and Mather measures, "Modeling, Dynamics, Optimization and Bioeconomics III"Editors: Alberto Pinto and David Zilberman, Proceedings in Mathematics and Statistics, 247-255 (2018) Springer Verlag

[235] A. Lopes and M. Sebastiani, Generic properties for random repeated quantum iterations, Quantum Studies: Mathematics and Foundations, Vol 2, pp 389-402 (2015)

[236] A. Lopes and M. Sebastiani, A detailed proof of the von Neummann's Quantum Ergodic Theorem, Quantum Studies: Mathematics and Foundations - Vol 4 - Issue 3, 263-285 (2017)

[237] A. Lopes and J. Mohr, Semiclassical limits, Lagrangian states and coboundary equations, Stochastics and Dynamics, Vol 17. N 2, 1750014 (19 pages) (2017)

[238] A. Lopes and G. Mantovani, The KMS Condition for the homoclinic equivalence relation and Gibbs probabilities, Sao Paulo Journ. of Math. Volume 13, Issue 1, pp 248-282 (2019)

[239] A. O. Lopes, J. K. Mengue, J. Mohr and C. G. Moreira, Large Deviations for Quantum Spin probabilities at temperature zero, Stochastics and Dynamics, Vol. 18, No. 06, 1850044 (2018)

[240] Y-G Lu, Quantum Markov Chains and classical random sequences. Nagoya Math. Journal. Vol. 139 (1995), pp. 173-183.

[241] A. Lozinski, K. Zyczowski and W. Slomczynski, Quantum iterated function systems, Physical Review E, Volume 68, 046110, (2003)

[242] I. Madsen and J. Tornehave, From calculus to cohomology: De Rham cohomology and characteristic classes. Cambridge University Press, 1997.

[243] W. A. Majewski, Quantum correlations; quantum probability approach, preprint Arxiv (2014)

[244] A. Mann, P. A. Mello and M. Revzen, A family of Weyl-Wigner transforms for discrete variables defined in a finite-dimensional Hilbert space, Quantum Studies (2017)

[245] V. Marchenko, Sturm-Liouville Operators and applications, Birkhauser (1986)

[246] A. Martinez, An introduction to semiclassical and Microlocal Analysis, Springer (2002)

[247] S. Mazzucchi, Mathematical Feynman path integrals and their applications, World Scientific.

[248] E. Merzbacher, Quantum Mechanics, John Wiley

[249] C. Majenz Entropy in Quantum Information Theory, PhD thesis, School of The Faculty of Science, University of Copenhagen (2018)

[250] V. Maslov and M. Fedoryuk, Semiclassical approximation in Quantum Mechanics, Reidel, Boston.

[251] P. D. Miller, Applied Asymptotics analysis, AMS, 2006

[252] M. M. Miranda, Análise Espectral em Espaços de Hilbert, Textos de Métodos Matemáticos, UFRJ (1990)

[253] N. Moiseyev, Non-Hermitian Quantum Mechanics,Cambridge University Press (2011)

[254] H. Muller-Kirsten, Introduction to Quantum Mechanics, World Scientific.

[255] J. D. Murray, Asymptotics analysis, Springer Verlag, 1984

[256] G. Murphy, C^* algebras and operator theory, Academic Press

[257] M. Nagasawa, Schrödinger Equations and Diffusion Theory, Birkhauser

[258] M. Nagasawa, Stochastic Processes in Quantum Physics

[259] P. Naaijkens, Quantum Spin Systems on Infinite Lattices, Arxiv (2013)

[260] I. Nechita and C. Pellegrini, Random repeated quantum interactions and random invariant states, Prob. Theory Relat. Fields, 152, pp 299-320 (2012)

[261] R. Newton, Quantum Physics, Springer Verlag

[262] E. Nelson, Dynamical Theories of Brownian motion, Princeton Press, 1985.

[263] E. Nelson, Quantum fluctuations, Princeton Press, 1985.

[264] M. Nielsen and I. Chuang, Quantum computation and quantum information. Cambridge University Press, 2000.

[265] S. Neshveyev and E. Størmer, Dynamical Entropy in Operator Algebras, Springer Verlag, (2006)

[266] Cesar R. de Oliveira, Introdução à Análise Funcional, Proj. Euclides, IMPA

[267] Cesar R. de Oliveira, Intermediate Spectral Theory and Quantum Dynamics, Birkhauser.

[268] I. S. Oliveira e R. S. Sarthour, Computação Quântica e Informação Quântica, V Escola do CBPF - Rio de Janeiro. (2004)

[269] M. Ohya and D. Petz, Quantum entropy and its use, Springer-Verlag, Berlin. 1993.

[270] F. Olver, Asymptotics and Special Functions, Academic Press (1974)

[271] K. Osterwalder and R. Schrader, Feynman-Kac formula for Euclidean Fermi and Bose Fields, Phys. Rev. Lett. 29 (1972) 1423

[272] K. Osterwalder and R. Schrader, Euclidean Fermi Fields and a Feynman-Kac formula for boson-fermion models, Helv. Phys. Acta 46, 277, (1973).

[273] J. Panangaden, Energy Full Counting Statistics in Return-to-Equilibrium Jane Panangaden, thesis McGill Univ (2016)

[274] J. B. Parkinson and D. Farnell, An Introduction to Quantum Spin Systems, Springer Verlag, 2010.

[275] K. R. Parthasarathy, Quantum Probability and strong Quantum Markov Processes, Quantum Prob. Comm, Vol XII, 171-198 (2003)

[276] K. R. Parthasarathy, An Introduction to Quantum Stochastic Calculus, Birkhauser (2012)

[277] F. Paugam, Les mathematiques de la physique moderne (2009) notas Institut de Mathématiques de Jussieu.

[278] M. Pavon, Hamilton's principle in stochastic mechanics. J. Math. Phys. 36 (1995), no. 12, 6774-6800.

[279] M. Pavon, Stochastic mechanics and the Feynman integral. J. Math. Phys. 41 (2000), no. 9, 6060-6078.

[280] M. Pavon, A new formulation of stochastic mechanics, Phys. Letters A, 209 (1995) 143-149

[281] F. Paugam, Towards the mathematics of quantum field theory, Springer, (2014)

[282] E. Prugovecki, Quantum Mechanics in Hilbert space. Academic Press, (1971)

[283] A. Perelomov, Generalized coherent states and their applications, Springer Verlag (1986)

[284] A. Peres, Separability criterion for density matrices. Phys. Rev. Lett. 77 (1996), no. 8, 1433-1415.

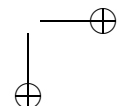
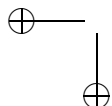
[285] D. Petz, Quantum Information Theory and Quantum Statistics, Springer Verlag (2008)

[286] G. Pedersen, C*-algebras and their automorphism groups, Academis Press, 1979

[287] G. Pedersen, Analysis now, Springer Verlag (1991)

[288] M. Pollicott and Yuri, Dynamical Systemas and Ergodic Theory, Cambridge Press

[289] W. Parry and M. Pollicott, Zeta functions and the periodic orbit structure of hyperbolic dynamics, *Astérisque* N. **187-188** (1990).

[290] C-A. Pillet, Quantum Dynamical Systems, in *Open Quantum Systems, I.* Lecture Notes in Math, 1880, pp 107-182, Springer Verlag (2006)

[291] E. Prugovechi, Quantum Mechanics in Hilbert Space, Academic Press.

[292] J. Renault, A Groupoid approach to C^*-algebras, Lecture Notes in Mathematics 793, Springer-Verlag, (1980)

[293] J. Renault, C^*-Algebras and Dynamical Systems, XXVII Coloquio Bras. de Matematica - IMPA (2009)

[294] G. Riviere, Long-time dynamics of the perturbed Schrödinger equation on negatively curved surfaces, Arxiv 2014

[295] D. Robert, Autour de l'approximation semi-classique, Birkhauser (1987)

[296] W. Reed and B. Simon, Methods os Modern Mathematical Physics, I, Functional Analysis, Springer.

[297] W. Reed and B. Simon, Methods os Modern Mathematical Physics, II, Fourier Analysis and Self-adjointness, Springer.

[298] W. de Roeck, C. Maes, K. Netockny and M. Schitz, Locality and nonlocality of classical restrictions of quantum spin systems with applications to quantum large deviations and entanglement, Arxiv 2013

[299] W. Rudin, Real and Complex Analysis, McGraw Hill, 1970

[300] W. Rudin, Functional Analysis, Press.

[301] Jonas F. G. Santos, Carlos H. S. Vieira and Pedro R. Dieguez, Quantum information in phase space, arXiv (2019)

[302] P. Sarnak, Arithmetic quantum chaos. In The Schur lectures (1992) (Tel Aviv), volume 8 of Israel Math. Conf. Proc., pages 183–236. Bar–Ilan Univ., Ramat Gan, (1995)

[303] P. Sarnak, Recent progress on the quantum unique ergodicity conjecture, Bull. of the AMS, Volume 48, Number 2, April, Pages 211–228 (2011)

[304] W. Slomczynski, Dynamical Entropy, Markov Operators and Iterated FunctionSystems, Institute of Mathematics, Jagiellonian University, Polland (2008)

[305] M. Schechter, Operator Methods in Quantum Mechanics, Dover.

[306] M. D. Schwartz, Quantum Field Theory and the Standard Model, Cambrigde Press (2013)

[307] L. Schulman, Tecniques and Applications of Path Integration, Dover

[308] R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics, Kluwer

[309] B. Simon, Quantum Mechanics for Hamiltonians defined as quadratic forms, Princeton Series in Physics (1971)

[310] B. Simon, Functional Integration and Quantum Physics, Academic Press.

[311] B. Simon, Semiclassical Analysis of low lying eigenvalues. I Nondegenerate Minima: Asymptotic expansion, Ann. Inst. Henry Poincare Vol XXXVIII, (3) , 295-307 (1983)

[312] B. Simon, Semiclassical Analysis of low lying eigenvalues. II tunneling, Ann. of Math 120, 89-118 (1984)

[313] W. Simon, Mathematics of the Spin, https://www.urmc.rochester.edu/labs/Simon-Lab/publications/pdfs/Spin.pdf

[314] Ya. Sinai, Probability Theory. Springer-Verlag, 1992.

[315] F. Spitzer, A variational characterization of finite Markov chains. Annals of Math. Statistics, Vol 43, No. 1, 1972, p. 303-307.

[316] A. Sinha, A. Vijay and U. Sinha, On the superposition principle in interference experiments, Arxiv (2015)

[317] C. Sogge, Hangzhou Lectures on Eigenfunctions of the Laplacian, Princenton Press (2014)

[318] C. Sparber, Semiclassical Quantum Dynamics and Bohmian trajectories, Notices of the AMS, Vol 63, n. 9 (2016)

[319] W. Slomczynski and K. Zyczowski, Quantum chaos: an entropy approach, J. math. Phys. 35 (11), (1994) pp 5674-5700

[320] W. Slomczynski, Dynamical Entropy, Markov Operators and Iterated Function Sys- tems. Jagiellonian University Press, (2003).

[321] S. Sternberg, A Mathematical Companion to Quantum Mechanics, Dover (2019)

[322] M. Swanson, Path Integrals and Quantum Processes, Dover (2014)

[323] M. Zworski, Semiclassical Analysis, AMS (2012)

[324] A. Zeilinger, R. Gahler, C. G. Shull, W. Treimer, and W. Mampe: Single-slit and double-slit diffraction of neutrons, Rev. Mod. Phys. 60, 1067 (1988).

[325] B. Shoshany, "Thinking Quantum": Lectures on Quantum Theory for High-School Students Arxiv (2018)

[326] W. Steeb and Y. Hardy, Bose, Spin and Fermi Systems, World scientific (2015)

[327] E. M. Stein and R. Shakarchi, Fourier Analysis: An Introduction, Princeton Press, (2003)

[328] E. Stein, Harmonic Analysis, Princeton University Press, (1993)

[329] F. Strocchi, An introduction to the mathematical structure of Quantum Mechanics, World Scientific, (2008)

[330] E. Stormer, Positive Linear Maps of Operator Algebras, Springer Verlag

[331] T. Sunada, Quantum ergodicity, Trend in Mathematics, Birkhauser Verlag, 175-196 (1997)

[332] L. A. Takhtajan, Quantum Mechanics for Mathematicians, AMS (2008)

[333] M. Taylor, Partial Differential Equations - Volume 2 Springer Verlag

[334] S. Teufel, Bohmian Mechanics: The Physics and Mathematics of Quantum Theory, Sprnger Verlag (2009)

[335] M. Terra Cunha, Noções de Informação Quântica, 26 Colquio Brasileiro de Matematica, (2007)

[336] J. Thayer, Operadores Auto-adjuntos e Equações Diferenciais Parciais, Impa, Rio de Janeiro (1987)

[337] M. Tomamichel, Quantum Infromation Processing with Finite Resources (2015)

[338] R. Tumulka, Bohmian Mechanics, Arxiv (2017)

[339] W. van Suijlekom, Noncommutative Geometry and Particle Physics, Springer (2015)

[340] V. Vladimirov, Equations of mathematical physics, MIR- 1984

[341] S. Vollinger, Geometry of the Schrödinger equation and stochastic mass transportation, Journal of Mathematical Physics, 46, (2005)

[342] J. von Neumann (Translator: Roderich Tumulka), Proof of the Ergodic Theorem and the H-Theorem in Quantum Mechanics, Arxiv (2010)

[343] Max-K. von Renesse, An optimal trasport view on Scrodinger's equation, Canad. Math. Bull. 55, no. 4, 858–869 (2012)

[344] M. W. Wong, Weyl trasforms, Springer Verlag, (1998)

[345] K. Yoshida, Functional Analysis, Oxford Press

[346] Yifeng Yu, A remark on the semi-classical measure from $-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V$ with a degenerate potential V. Proc. Amer. Math. Soc. 135, no. 5, 1449–1454 (2007)

[347] S. Zelditch, Quantum ergodicity and mixing of eigenfunctions, in J-P Françoise, G. Naber, and T. Tsun, (editors), Encyclopedia of mathematical physics. Vol. 1, 2, 3, 4, 5, Academic Press/Elsevier Science (2006)

[348] S. Zelditch, Uniform distribution of eigenfunctions on compact hyperbolic surfaces. Duke Math. J. 55 (1987), no. 4, 919-941 (1987)

[349] P. Zhang, Wigner Measure and Semiclassical Limits of Nonlinear Schrodinger Equations. AMS, 2008

[350] J. Zinn-Justin, Path Integrals in Quantum Mechanics, Oxford Press (2005)

[351] M. Zworski, Semiclassical Analysis, AMS, (2012)

[352] M. Waldschmidt, P. Moussa, J.-M Luck and C. Itzykson, From Number Theory to Physics, Springer (1992)

[353] N. Weaver, Mathematical Quantization, Chapamnn and Hall (2001)

[354] H. Wio, Path Integrals for Stochastic Processes, World Scientfic, (2013)

[355] P. Woit, Quantum Theory, Groups and Representations: an introduction - Lecture Notes, Columbia University (2015)

[356] M. Wolf, Quantum Channels and Operations - Guided Tour (preprint on line)

[357] W. Wrezinski, Mecânica Clássica Moderna, Edusp (1997)

Índice